

福井大学審査

学位論文 [博士(工学)]

窒化物半導体電子デバイスの数値シミュレーションに関する研究

平成 26 年 3 月

児玉 和樹

学位論文目次

第1章 序論	1
1-1 本研究の背景	1
1-2 本研究の目的	5
1-3 本論文の構成	6
第2章 半導体のエネルギーバンド構造と電子の散乱確率の計算	12
2-1 半導体のエネルギーバンド構造	12
2-1-1 はじめに	12
2-1-2 経験的擬ポテンシャル法	12
2-1-3 ウルツ鉱構造における経験的擬ポテンシャル法	17
2-1-4 フルバンド計算プログラム	34
2-1-5 電子の状態密度	36
2-2 散乱機構	38
2-2-1 はじめに	38
2-2-2 有極性光学フォノン散乱	38
2-2-3 変形ポテンシャル散乱	42
2-2-4 圧電ポテンシャル散乱	45
2-2-5 イオン化不純物散乱	47
2-2-6 転位散乱	49
2-2-7 衝突イオン化	50
2-3 まとめ	58

第3章	フルバンド構造を用いた電子輸送解析	62
3-1	はじめに	62
3-2	フルバンド電子輸送解析の手法	63
3-2-1	ボルツマン輸送方程式	63
3-2-2	モンテカルロ法によるボルツマン輸送方程式の解法	66
3-2-3	輸送解析における電子状態の選択	69
3-2-4	電子輸送解析プログラム	75
3-3	窒化物半導体の電子輸送解析結果	77
3-3-1	速度-電界特性	77
3-3-2	衝突イオン化係数	83
3-4	まとめ	85
第4章	フルバンドデバイス解析	87
4-1	はじめに	87
4-2	フルバンドデバイス解析の手法	87
4-2-1	ボルツマン輸送方程式とポアソン方程式の 自己無撞着計算	87
4-2-2	境界条件	93
4-2-3	デバイス解析プログラム	97
4-3	フルバンドデバイス解析結果	99
4-3-1	基本解析	99
4-3-2	高周波解析	105
4-3-3	三端子耐圧解析	118
4-4	まとめ	121

第5章 結論	123
謝辞	125
学術論文および研究発表	126

第1章 序論

1-1 本研究の背景

現代社会において、半導体デバイスは、パソコン、携帯電話、家電製品をはじめ、ハイブリッド車や新幹線等の輸送機器、医療機器、産業用重機械など数多くの機器システムに応用され、日常生活に欠かすことのできない要素となっている。電子情報技術産業協会による世界の半導体市場規模の推移と予測(図 1-1)に示されるように[1]、半導体市場の中心はシリコン(Si)を用いた集積回路(integrated circuit; IC)である。低欠陥で高品質な Si エピ結晶技術と超微細プロセス技術により実現された高度な集積回路技術が今日の半導体市場を牽引している。Si 大規模集積回路では、比例縮小則(scaling rule)に基づく素子の微細化と高誘電率膜を用いた三次元ゲート構造[2]などの最新技術の導入により高性能化を追求してきた。また、Si パワーデバイスの分野においても、縦型 MOS (metal-oxide-semiconductor)構造[3]や super junction 構造[4]といった新規技術を導入することにより特性向上が図られてきた。2013 年のパワー半導体の世界市場規模は約 140 億ドルとなる見込みだが、2020 年には 2 倍以上高い 290 億ドルに拡大するものと予測されている[5]。このようなパワー半導体市場の拡大とともに、近年、温室効果ガスの排出による地球温暖化の問題が活発に議論されている。この対策として、より低損失で省エネルギー特性に優れた次世代パワー半導体デバイスが求められている。

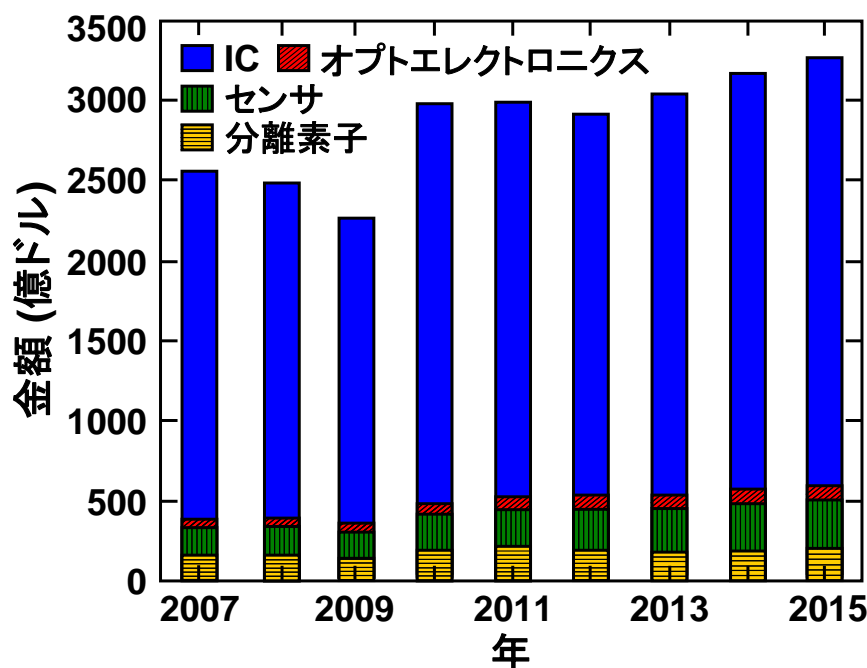


図 1-1 半導体に関する世界市場規模の推移と予測[1]

しかし、Si パワーデバイスの特性は、既に Si 材料の物性限界からくる性能限界に近づいている。そのため、Si に代わる新たな半導体材料を用いたパワーデバイスの開発に期待が集まっている。この要求を実現できる材料として注目されているのが、窒化ガリウム(GaN)やシリコンカーバイド(SiC)などのワイドバンドギャップ半導体である[6, 7]。表 1 に Si, ガリウム砒素(GaAs), SiC と GaN の物性値をまとめる。GaN は、バンドギャップと絶縁破壊電界が大きく、また、高電界下の電子速度が高いことに加えて、Si より高い電子移動度を有することが特徴である。さらに、窒化アルミニウム(AlN)あるいはその三元混晶半導体である AlGaIn とのヘテロ接合を形成することにより、 $\sim 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ の高濃度な 2 次元電子ガスを実現できる[8]。このような特徴から、GaN は Si に比べ、優れた Baliga 性能指数(BFOM)を有する。BFOM はパワーデバイス性能の材料固有の限界性能指標を表し、次式によって与えられる[9]。

$$\text{BFOM} = \varepsilon \mu E_C^3 \quad (1-1)$$

ここで、 ε は誘電率、 μ は移動度、 E_C は絶縁破壊電界である。式(1-1)で計算される GaN の BFOM は Si のものに比べ、2340 倍高く、そのため、GaN は優れたパワーデバイス特性を示す材料として期待されている。

表 1 各半導体材料の特性比較 [10, 11]

材料項目	Si	GaAs	4H-SiC	GaN
バンドギャップ E_g (eV)	1.12	1.42	3.26	3.40
絶縁破壊電界 E_C (MV/cm)	0.25	0.4	3.0	3.3
電子移動度 μ (cm^2/Vs)	1500	8500	800	2000
高電界電子速度 v (10^7 cm/s)	1	2	2	2.5
比誘電率 ε_s	11.8	12.8	9.7	9

GaN 系パワーデバイスのパワーエレクトロニクス市場への導入は始まったばかりであり[5]、一層の低コスト化と高性能化を進める必要がある。低コスト化に向けては、大口径化が可能な Si 基板を用いた Si 基板上 GaN デバイスの研究が盛んに行われている[12, 13]。しかし、Si は GaN に比べ格子定数が大きく、Si 基板上の GaN には、格子不整合によって生じる高い転位密度が含まれるため[14]、高性能化に課題が残る。基板との格子不整合を避けるため、GaN を基板として使用した自立 GaN 基板上 GaN デバイスの研究も行われ、転位密度の低減によるゲートリーク特性の改善が報告されている[15, 16]。このような技術発展を背景に GaN がパワーエレクトロニクス市場に占める割合は 2020 年には 10 %を越えるものと期待されている[5]。

次世代パワーデバイスとして期待される GaN デバイスでは、AlGaN とのヘテロ接合を利用した AlGaN/GaN HEMT (high electron mobility transistor) が主要な構造である。AlGaN/GaN HEMT は Khan らによって初めて実現された[17]。結晶品質の向上に加えて、後方障壁層, MIS (metal-insulator-semiconductor) 構造あるいはフィールドプレート(field plate)構造の導入により、GaN 系パワーデバイスの特性は大きく向上してきた。ここで、パワーデバイスの特性を比較するために、一般に用いられる特性オン抵抗と耐圧の関係を図 1-3 にまとめる。

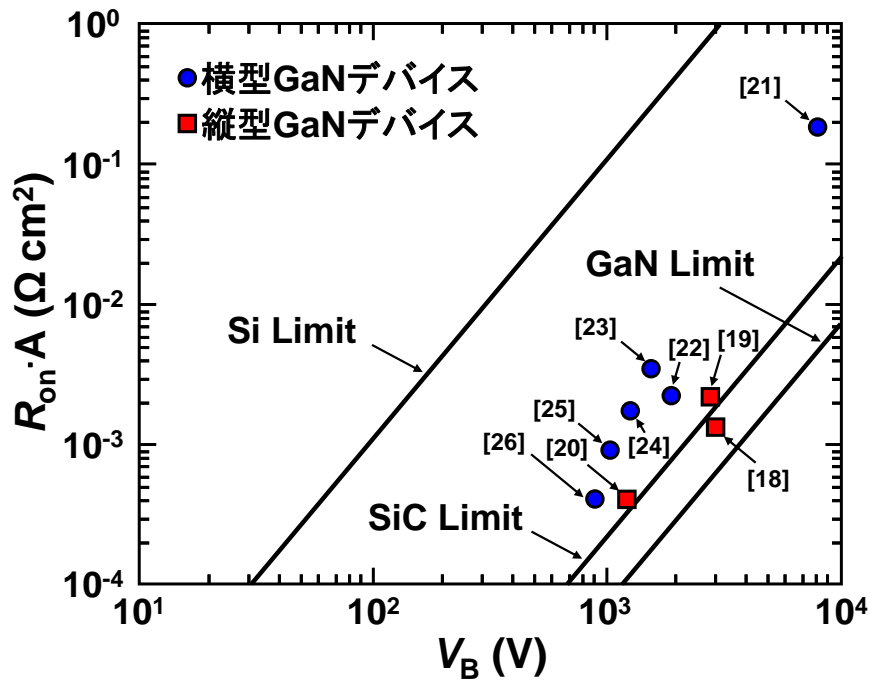


図 1-3 特性オン抵抗と耐圧の比較

図 1-3 に示される各半導体の理論線は次式によって計算した[9]。

$$R_{on}A = \frac{4 V_B^2}{\epsilon \mu E c^3} \quad (1-2)$$

ここで、 R_{ON} はオン抵抗、 A はデバイス面積、 V_B は耐圧である。特性オン抵抗と耐圧の関係については、損失の抑制の観点から低い特性オン抵抗であること、一方、許容電力を増大させる観点から高耐圧であることが望ましい。つまり、図 1-3 では、右下へ行くほどパワーデバイスとして優れることを意味する。特性オン抵抗と耐圧の関係において、現在までに報告されている GaN 系デバイスは Si の理論限界を大きく上回っている。また、もっとも優れた結果は縦型 p-n ダイオードで実現されており、SiC の理論限界をも上回っている[18]。デバイス構造を横型と縦型に分類して特性オン抵抗と耐圧の関係を比較すると(縦型[18-20],

横型[21-26])、現状の横型デバイスの結果は縦型デバイスのものに比べて劣ることが分かる。しかしながら、特性オン抵抗の低減に向けては、高い移動度($\sim 2000 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$)とシートキャリア濃度($\sim 10^{13} \text{ cm}^{-2}$)が実現できる横型構造が縦型構造に比べて優位である[27, 28]。つまり、現状の横型デバイスの耐圧を縦型デバイスと同等の耐圧まで向上することにより、GaN デバイスの特性オン抵抗と耐圧の関係をさらに改善することができると期待される。これまでも、ゲートあるいはドレイン電極にフィールドプレート構造を用いることにより、主要な横型構造である AlGaN/GaN HEMT の耐圧改善が実測と理論解析の両面から図られてきた[29, 30]。しかし、それらの理論解析は、電界集中の緩和を考慮することにより耐圧改善の傾向を検討したものであり、耐圧を決定する物理現象である衝突イオン化を直接考慮したものではなかった。また、AlGaN/GaN HEMT について、衝突イオン化に基づく耐圧を計算した報告はほとんど行われていない[31]。AlGaN/GaN HEMT の耐圧向上を目指す上で、その理論予測を行うことは、現状の耐圧機構の原因を探究するためにも必要である。

また、窒化物半導体デバイスでは、パワーデバイスの特性に関する研究だけでなく、高周波デバイスの特性の検討(特に、電流利得遮断周波数(f_T))も活発に行われている。GaN チャネル HEMT についてのゲート長(L_g)と f_T の推移に示されるように(図 1-4)、GaN チャネル HEMT の f_T は、 L_g の短縮とともに大きく進歩してきた。

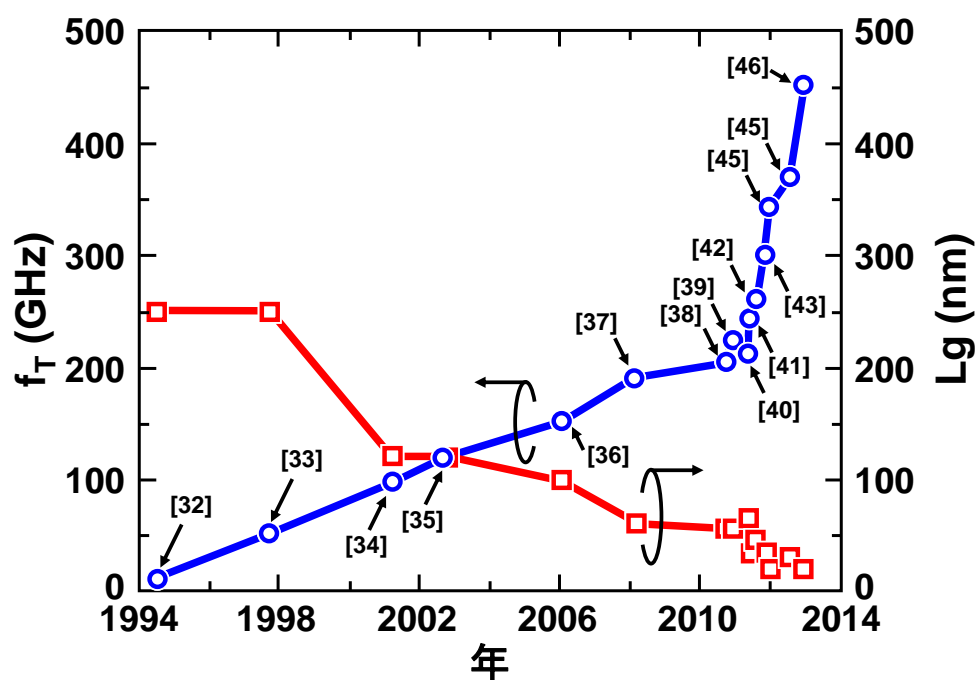


図 1-4 GaN チャネル HEMT についての L_g と f_T の推移

特に、2010 年以降、アメリカやヨーロッパの研究グループが、競合して f_T 向上の報告を行っている。図 1-4 から分かるように、 f_T の世界記録(454 GHz)は 500 GHz に到達しつつある

が[46]、同時に、 L_g の短縮は既に 20 nm にまで達しており、 L_g 短縮による f_T の一層の向上は困難になり始めている。そのため、窒化物半導体デバイスにおけるテラヘルツ動作の実現には、新たなアプローチを取り入れる必要がある。そのひとつとして考えられるのが、GaN の代わりに窒化インジウム(InN)をチャネル材料として導入する方法である。これは、InN が GaN に比べて小さい有効質量と高い電子速度を有するためである[47]。しかしながら、現状の InN のエピ成長技術は GaN のものほど進んでおらず、期待されるようなデバイス特性は得られていない[48]。また、優れた高周波特性が期待できるにもかかわらず、InN チャネルデバイスの f_T に関する理論解析は行われてない。このように、窒化物半導体デバイスの f_T の検討においては、実験報告が先行して行われており、本来、デバイス動作の理解や未知の半導体のデバイス特性の予測のために利用される理論解析はあまり行われていない。

1-2 本研究の目的

本研究の目的は、窒化物半導体デバイスで期待される高周波特性と高電圧特性に関して、 f_T 向上に向けた理論計算と理論耐圧の改善を議論することである。しかし、我々が従来用いてきたデバイスシミュレータには、解析バンド構造モデルが用いられてきたため[49]、高電界下の高エネルギー電子状態を扱うにはバンド構造の精度が不十分である。このため、速度オーバーシュート(velocity overshoot)や衝突イオン化などの高電界効果を正しく解析することはできなかった。速度オーバーシュートは短チャネルデバイスで顕著に起こる現象であり、高周波デバイスの解析では、特に重要な現象である。また、衝突イオン化はデバイス耐圧を決定する物理機構であり、正確な耐圧計算には必要不可欠である。そこで、本論文では、経験的擬ポテンシャル法を用いることにより、複雑なエネルギーバンドを数値データ化した。このようにして、計算したフルバンド構造を基に、電子輸送解析、さらには、二次元デバイス解析が可能な計算プログラムの作成について記述する。

また、構築したデバイス解析プログラムを用いて、GaN に代わるチャネル材料として、小さい有効質量と高い電子ピーク速度をもつ InN あるいはその三元混晶半導体である InGaIn をチャネル材料とした InGaIn チャネル HEMT の高周波特性の解析を行い、 f_T 向上について議論する。また、速度オーバーシュートと f_T に関して、これまで議論されたことのないゲート-ドレイン間距離依存性について検討する。

さらに、従来の衝突イオン化モデルを改善した新たなモデルを本論文で提案し、衝突イオン化の遷移確率と衝突イオン化係数の計算に加えて、衝突イオン化によって決定されるデバイスの三端子耐圧の計算結果を比較し、提案モデルが、従来モデルに比べて、イオン化係数およびデバイス耐圧の計算に適したモデルであることについて議論する。加えて、AlGaIn/GaN HEMT の耐圧改善の指針について考察する。

1-3 本論文の構成

本章に続く第 2 章では、電子のエネルギーバンド構造の計算に用いた経験的擬ポテンシャル法の原理とウルツ鉱構造結晶(GaN, InN, AlN)のバンド構造の計算結果について述べる。また、バンド構造を用いて決定する状態密度と各散乱機構の散乱確率について、それぞれの計算方法と結果を記述する。散乱機構の衝突イオン化過程では、本論文で新たに提案するモデルについても議論する。

第 3 章では、フルバンド電子輸送解析の計算手法と結果について述べる。計算手法として、モンテカルロ法を用いたボルツマン輸送方程式による電子輸送の解法と、フルバンド計算(エネルギーバンド, 状態密度, そして散乱確率など)を用いた電子状態の決定方法を記述する。計算結果として、速度-電界特性と衝突イオン化係数を示す。衝突イオン化係数の計算では、衝突イオン化モデルの違いによる精度と計算時間を比較する。

第 4 章では、フルバンドデバイス解析の計算手法と結果について述べる。計算手法として、デバイス内の電子分布と電位分布それぞれの決定方法と境界条件を示し、また、ボルツマン輸送方程式と二次元ポアソン方程式を結合させた自己無撞着計算について記述する。また、窒化物半導体デバイスの高周波特性と AlGaIn/GaN HEMT の耐圧計算を行い、窒化物半導体電子デバイスの可能性について考察する。

第 5 章では、本論文の結論を記述する。

参考文献

- [1] 電子情報技術産業協会, “WTST 2013 年秋季半導体予測について,” 12 月, 2013.
- [2] S. Damaraju, V. George, S. Jahagirdar, T. Khondker, R. Milstrey, S. Sarkar, S. Siers, I. Stolerio, and A. Subbiah, “A 22nm IA multi-CPU and GPU system-on-chip,” IEEE international Solid-State Circuits Conference, 19, 2011.
- [3] T. Sasaki, T. Imamoto, and T. Endoh, “Temperature dependency of driving current in high-k/metal gate MOSFET and its influence on CMOS inverter circuit,” IEICE Trans. Electron., 5, 751, 2011.
- [4] T. Fujihira, “Theory of semiconductor superjunction devices,” Jpn. J. Appl. Phys., 36, 6257, 1997.
- [5] 矢野経済研究所, “パワー半導体の世界市場に関する調査結果 2013”, 5 月, 2013.
- [6] W. Saito, Y. Takada, M. Kuraguchi, K. Tsuda, I. Omura, T. Ogura, and H. Ohashi, “High breakdown voltage AlGaIn-GaN power-HEMT design and high current density switching behavior,” IEEE Trans. on Electron Devices, 50, 2528, 2003.
- [7] J. Wang, T. Zhao, J. Li, A. Q. Huang, R. Callanan, F. Husna, and A. Agarwal, “Characterization, modeling, and application of 10-kV SiC MOSFET,” IEEE Trans. on Electron Devices, 55, 1798, 2008.
- [8] O. Ambacher, B. Foutz, J. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, A. J. Sierakowshki, W. J. Schaff, L. F. Eastman, R. Dimitrov, A. Mitchell, and M. Stutzmann, “Two dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization in undoped and doped AlGaIn/GaN heterostructures,” J. Appl. Phys., 87, 334, 2000.
- [8] H. Sasaki, G. Yusa, T. Someya, Y. Ohno, T. Noda, H. Akiyama, Y. Kadoya, and H. Noge, “Transport properties of two-dimensional electron gas in AlGaAs/GaAs selectively doped heterojunctions with embedded InAs quantum dots,” Appl. Phys. Lett., 67, 3444, 1995.
- [9] A. Q. Huang, “New unipolar switching power device figures of merit,” IEEE Electron Device Lett., 25, 298, 2004.
- [10] S. J. Pearton, F. Ren, A. P. Zhang, and K. P. Lee, “Fabrication and performance of GaIn electronics devices,” Materials Science and Engineering R 30, 55, 2000.
- [11] T. Nanjo, A. Imai, Y. Suzuki, Y. Abe, T. Oishi, M. Suita, E. Yagyu, and Y. Tokuda, “AlGaIn channel HEMT with extremely high breakdown voltage,” IEEE Trans. on Electron Devices, 60,

1046, 2013.

- [12] P. Srivastave, J. Das, D. Visalli, M. V. Hove, P. E. Malinowski, D. Marcon, S. Lenci, K. Geens, K. Cheng, M. Leys, S. Decoutere, R. P. Mertens, and G. Borghs, "Record breakdown voltage (2200 V) of GaN DHFETs on Si with 2- μ m buffer thickness by local substrate removal," *IEEE Electron Device Lett.*, 32, 30, 2011.
- [13] J. G. Lee, B. R. Park, H. J. Lee, M. Lee, K. S. Seo, and H. Y. Cha, "State-of-the-art AlGaIn/GaN-on-Si heterojunction field effect transistors with dual field plates," *Appl. Phys. Express.* 5, 066502, 2012.
- [14] M. Seon, T. Prokofyeva, M. Holtz, S. A. Nikishin, N. N. Faleev, and H. Temkin, "Selective growth of high quality GaN on Si(111) substrates," *Appl. Phys. Lett.*, 76, 1842, 2000.
- [15] J. B. Limb, D. Yoo, J. H. Ryou, W. Lee, S. C. Shen, and R. D. Dupunis, "High performance GaN pin rectifiers grown on free-standing GaN substrates," *Electronics Lett.*, 42, 1313, 2006.
- [16] R. Hasegawa, N. Yafune, H. Tokuda, Y. Mori, H. Amano, and M. Kuzuhara, "Effects of substrate defects on the gate leakage current of AlGaIn/GaN heterojunction FETs fabricated on Na flux bulk GaN," *SSDM 2011, AL-6-5*, 620, 2011.
- [17] M. A. Khan, J. M. V. Hove, J. N. Kuznia, and D. T. Olson, "High electron mobility GaN/Al_xGa_{1-x}N heterostructures grown by low-pressure metalorganic chemical vapor deposition," *Appl. Phys. Lett.*, 58, 2408, 1991.
- [18] Y. Hatakeyama, K. Nomoto, A. Terano, N. Kaneda, T. Tsuchiya, T. Mishima, and T. Nakamura, "High-breakdown-voltage and low-specific-on-resistance GaN p-n junction diodes on free-standing GaN substrates fabricated through low-damage field-plate process," *Jpn. J. Appl. Phys.*, 50, 028007, 2013.
- [19] I. C. Kizilyalli, A. P. Edwards, H. Nie, D. Disney, and D. Bour, "High voltage vertical GaN p-n diodes with avalanche capability," *IEEE Trans. on Electron Devices*, 60, 3067, 2013.
- [20] Y. Hatakeyama, K. Nomoto, N. Kaneda, T. Kawano, T. Mishima, and T. Makamura, "Over 3.0 GW/cm² figure-of-merit p-n junction diodes on free-standing GaN substrates," *IEEE Electron Device Lett.*, 32, 1674, 2011.
- [21] Y. Uemoto, D. Shibata, M. Yanagihara, H. Ishida, H. Matsuo, S. Nagai, N. Batta, L. Ming, T. Ueda, T. Tanaka, and D. Ueda, "8300 V blocking voltage AlGaIn/GaN power HFET with thick poly-AlN passivation," *IEDM Tech. Dig.*, Dec. 10, 2007, 861.

- [22] Y. Dora, A. Chakraborty, L. McCarthy, S. Keller, S. P. DenBaars, and U. K. Mishra, "High breakdown voltage achieved on AlGaIn/GaN HEMTs with integrated slant field plates," IEEE Electron Device Lett., 27, 713, 2006.
- [23] N. Tipirneni, A. Koudymov, V. Adivarahan, J. Yang, G. Simin, and M. A. Khan, "The 1.6-kV AlGaIn/GaN HFETs," IEEE Electron Device Lett., 27, 716, 2006.
- [24] X. Huili, Y. Dora, A. Chini, S. Heikman, S. Keller, and U. K. Mishra, "High breakdown voltage AlGaIn-GaN HEMTs achieved by multiple field plates," IEEE Electron Device Lett., 25, 161, 2004.
- [25] J. Shi, L. F. Eastman, X. Xin, and M. Pophristic, "High performance AlGaIn/GaN power switch with HfO₂ insulation," Appl. Phys. Lett., 95, 4, 042103, 2009.
- [26] E. B. Treidel, F. Brunner, O. Hilt, E. Cho, J. Würfl, and G. Tränkle, "AlGaIn/GaN/GaN:C back-barrier HEMTs with breakdown voltage of over 1 kV and low $R_{ON} \times A$," IEEE Trans. on Electron Devices, 57, 1674, 2010.
- [27] M. J. Manfra, N. G. Weimann, J. W. P. Hsu, L. N. Preiffer, K. W. West, S. Syed, H. L. Stormer, W. Pan, D. V. Lang, S. N. G. Chu, G. Kowach, A. M. Sergent, J. Caissie, K. M. Molvar, and R. J. Molnar, "High mobility AlGaIn/GaN heterostructures grown by plasma-assisted molecular beam epitaxy on semi-insulating GaN templates prepared by hydride vapor phase epitaxy," J. Appl. Phys., 92, 338, 2002.
- [28] T. Kojima, H. Tokuda, and M. Kuzuhara, "Comparison of 2DEG density and mobility increase by annealing AlGaIn/GaN heterostructures deposited with Ti/Al, Ti/Au, V/Au, and Ni/Au," Phys. Status Solidi C 10, 1405, 2013.
- [29] Y. Pie, Z. Chen, D. Brown, S. Keller, S. P. Denbaars, and U. K. Mishra, "Deep-submicrometer AlGaIn/GaN HEMTs with slant field plates," IEEE Electron Device Lett., 30, 328, 2009.
- [30] J. G. Lee, S. W. Han, B. R. Park, and H. Y. Cha, "Unidirectional AlGaIn/GaN-on-Si HFETs with reverse blocking drain," Appl. Phys. Express, 7, 014101, 2014.
- [31] Y. Ando, W. Contrata, N. Samoto, H. Miyamoto, K. Matsunaga, M. Kuzuhara, K. Kunihiro, K. Kasahara, T. Nakayama, Y. Takahashi, N. Hayama, and Y. Ohno, "Gate Length Scaling for Al_{0.2}Ga_{0.8}N/GaN HJFETs: Two-Dimensional Full Band Monte Carlo Simulation Including Polarization Effect," IEEE Trans. on Electron Devices, 47, 1965, 2000.
- [32] M. A. Khan, J. N. Kuznia, D. T. Olson, W. J. Schaff, J. W. Burm, and M. S. Shur, "High deep submicron AlGaIn/GaN heterostructure field effect transistors for microwave and high

temperature applications,” Device Research Conference 52nd annual, 149, 1994.

- [33] Y. F. Wu, B. P. Keller, P. Fini, J. Puskas, M. Le, N. X. Nguyen, C. Nguyen, D. Widman, S. Keller, S. P. Denbaars, and C. Nguyen, “Short-channel $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}/\text{GaN}$ MODFETs with power density >3 W/mm at 18 GHz,” *Electronics Lett.*, 33, 1742, 1997.
- [34] M. Micovic, N. X. Nguyen, P. Janke, W. S. Wong, P. Hashimoto, L. M. McCray, and C. Nguyen, “GaN/AlGaN high electron mobility transistors with f_T of 110GHz,” *Electronics Lett.*, 36, 358, 2000.
- [35] V. Kumar, W. Lu, R. Schwindt, A. Kuliev, G. Simin, J. Yang, M. A. Khan, and I. Adesida, “AlGaN/GaN HEMTs on f_T of over 120GHz,” *Electronics Lett.*, 36, 358, 2000.
- [36] T. Palacios, A. Chakraborty, S. Heikman, S. Keller, S. P. DenBaars, and U. K. Mishra, “AlGaN/GaN High electron mobility transistors with InGaN back-barriers,” *Electronics Lett.*, 36, 358, 2000.
- [37] M. Higashiwaki, T. Mimura, and T. Matsui, “AlGaN/GaN heterostructure field-effect transistors on 4H-SiC substrates with current-gain cutoff frequency of 190 GHz,” *Appl. Phys. Express*, 1, 021103, 2008.
- [38] H. Sun, A. R. Alt, H. Benedickter, E. Feltin, J. F. Carlin, M. Gonschorek, N. Grandjean, and C. R. Bolognesi, “205-GHz (Al, In)N/GaN HEMTs,” *IEEE Electron Device Lett.*, 31, 957, 2010.
- [39] J. W. Chung, T. W. Kim, and T. Palacios, “Advanced gate technologies for state-of-the-art f_T in AlGaN/GaN HEMTs,” in *IEDM Tech. Dig.*, 2010, 676.
- [40] D. S. Lee, X. Gao, S. Guo, and T. Palacios, “InAlN/GaN HEMTs with AlGaN back barriers,” *IEEE Electron Device Lett.*, 32, 617, 2011.
- [41] D. S. Lee, J. W. Chung, H. Wang, X. Gao, S. Guo, P. Fay, and T. Palacios, “245-GHz InAlN/GaN HEMTs with Oxygen plasma treatment,” *IEEE Electron Device Lett.*, 32, 755, 2011.
- [42] K. Shinohara, D. Regan, I. Milosavljevic, A. L. Corrin, D. F. Brown, P. J. Willadsen, C. Butler, A. Schmitz, S. Kim, V. Lee, A. Ohoka, P. M. Asbeck, and M. Micovic, “Electron velocity enhancement in laterally scaled GaN DH-HEMTs with f_T of 260 GHz,” *IEEE Electron Device Lett.*, 32, 1074, 2011.
- [43] D. S. Lee, X. Gao, S. Guo, D. Kopp, P. Fay, and T. Palacios “300-GHz InAlN/GaN HEMTs with InGaN back barrier,” *IEEE Electron Device Lett.*, 32, 1525, 2011.
- [44] K. Shinohara, D. Regan, A. Corrin, D. Brown, S. Burnham, P. J. Willadsen, I. A. Rodriguez,

- M. Cunningham, C. Butler, A. Schmitz, S. Kim, B. Holden, D. Chang, V. Lee, A. Ohoka, P. M. Asbeck, and M. Micovic, "Deeply-Scaled self-aligned-gate GaN DH-HEMTs with ultrahigh cutoff frequency," in IEDM Tech. Dig., 2011, 453.
- [45] Y. Yue, Z. Hu, J. Guo, B. S. Rodriguez, G. Li, R. Wang, F. Faria, T. Fang, B. Song, X. Gao, S. Guo, T. Kosel, G. Snider, P. Fay, D. Jena, and H. Xing, "InAlN/AlN/GaN HEMTs with regrown ohmic contacts and f_T of 370 GHz," IEEE Electron Device Lett., 33, 988, 2012.
- [46] K. Shinohara, D. C. Regan, Y. Tang, A. L. Corrion, D. F. Brown, J. F. Robinson, H. H. Fung, A. Schmitz, T. C. Oh, S. J. Kim, P. S. Chen, R. G. Nagele, A. D. Margomenos, and M. Micovic, "Scaling of GaN HEMTs and Schottky diodes for submillimeter-wave MMIC applications," IEEE Trans. on Electron Devices, 60, 2982, 2013.
- [47] H. Morkoc, "Handbook of nitride semiconductors and devices, volume 1, materials properties, physics growth", (Wiley-VCH, Berlin, 2008).
- [48] H. Morkoc, "Handbook of nitride semiconductors and devices, volume 3, GaN-based optical and electronic devices", (Wiley-VCH, Berlin, 2008).
- [49] H. Makino, N. Ishikawa, K. Shiojima, and M. Kuzuhara, "Theoretical investigation of GaN-based diodes with recessed composite Schottky-barrier structure," J. J. Appl. Phys., 48, 04C103, 2009.

第2章 半導体のエネルギーバンド構造と電子の散乱確率の計算

2-1 半導体のエネルギーバンド構造

2-1-1 はじめに

半導体物理の理解や電子デバイス内のキャリアの輸送解析を行う上で、結晶中のエネルギーバンド構造を理解することは非常に重要である。ここでは、エネルギーバンド構造を解析的に扱う方法ではなく、数値的に計算する方法について述べる。バンド構造の計算方法として、擬ポテンシャル法(pseudopotential method)[1], $k \cdot p$ 摂動法($k \cdot p$ method)[2], 直交化された平面波法(orthogonalized plane wave)[3], 強結合法(tight binding)[4]などがある。本論文では、経験的擬ポテンシャル法(empirical pseudopotential method)によって、エネルギーバンド構造の計算を行う。この計算方法を採用した理由は、経験的擬ポテンシャル法が(1) 実験で得られるバンドギャップや有効質量を高精度で再現でき、(2) 計算に用いるパラメータが他の計算方法に比べて少ないため、計算に要する時間が短くできるという特徴をもつためである。そのため、この方法は様々な半導体のバンド計算に利用されてきた[5-7]。

2-1-2 経験的擬ポテンシャル法

経験的擬ポテンシャル法では、結晶中の電子を内殻電子と外殻電子に分け、内殻電子と原子核がひとかたまりであると仮定する。この仮定により、外殻電子に対する実効的なポテンシャルを、結晶中の原子核付近で非常に深く、空間的に激しく変化するポテンシャルを、緩やかに変化する実効ポテンシャルにとして置き換えることができる。この様子を結晶中の実ポテンシャルと実効ポテンシャルの模式図として図 2-1 に示した。

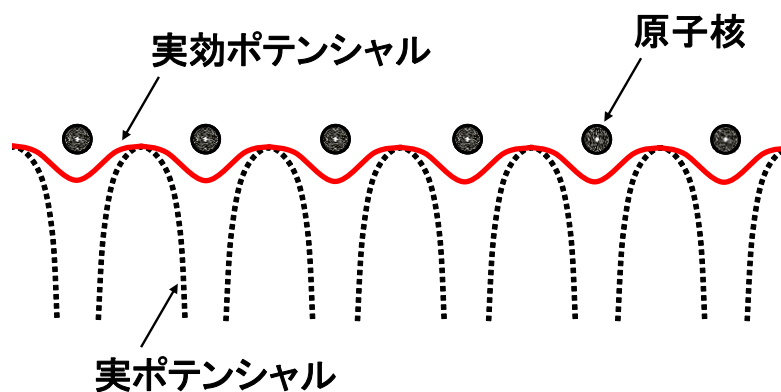


図 2-1 実ポテンシャルと実効ポテンシャルの模式図

この実効ポテンシャル(擬ポテンシャル)を考慮したシュレーディンガー方程式(Schrödinger equation)を解くことにより、エネルギーバンド構造が求まる。また、経験的擬ポテンシャル法では、有効質量やバンドギャップなどの物理パラメータの実験値を高精度で再現できるように擬ポテンシャルを調整する。結晶中の電子状態は次式を解くことにより求められる。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k}) \Psi(\mathbf{r}) \quad (2-1)$$

ここで、 \hbar はプランク定数/ 2π 、 m は電子質量、 Ψ は電子の波動関数、 V はポテンシャルエネルギー、 E は電子のエネルギー、 \mathbf{k} は波数ベクトル、 \mathbf{r} は位置ベクトルである。いま、内殻電子の波動関数とエネルギーをそれぞれ φ_j , E_j とすると、式(2-1)は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] |\varphi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r})\rangle = E_j |\varphi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r})\rangle \quad (2-2)$$

と表すことができる。外殻電子の波動関数 Ψ_n と内殻電子の波動関数 φ_j は直交しなければならないので、

$$\langle \varphi_j | \Psi_n \rangle = 0 \quad (2-3)$$

となる。この直交関係は、外殻電子の Ψ_n を

$$|\Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})\rangle = |\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})\rangle - \sum_j \langle \varphi_j | \psi_n \rangle |\varphi_j\rangle \quad (2-4)$$

と仮定したとき、満たされる。これは次式によって確認できる。

$$\begin{aligned} \langle \varphi_j | \Psi_n \rangle &= \langle \varphi_j | \psi_n \rangle - \sum_j \langle \varphi_j | \psi_n \rangle \langle \varphi_j | \varphi_j \rangle \\ &= \langle \varphi_j | \psi_n \rangle - \sum_j \langle \varphi_j | \psi_n \rangle \delta_{j,j} \\ &= \langle \varphi_j | \psi_n \rangle - \langle \varphi_j | \psi_n \rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2-5)$$

ここで、 δ はクロネッカーのデルタ(Kronecker delta)関数である。式(2-4)を式(2-1)に代入することにより、

$$\begin{aligned}
& \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] |\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})\rangle = E_n(\mathbf{k}) |\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})\rangle \\
& \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] |\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})\rangle - \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \sum_j \langle \varphi_j | \psi_n \rangle |\varphi_j\rangle \\
& \quad = E_n(\mathbf{k}) |\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})\rangle - E_n(\mathbf{k}) \sum_j \langle \varphi_j | \psi_n \rangle |\varphi_j\rangle \\
& \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] |\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})\rangle - \sum_j \langle \varphi_j | \psi_n \rangle \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] |\varphi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r})\rangle \\
& \quad = E_n(\mathbf{k}) |\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})\rangle - E_n(\mathbf{k}) \sum_j \langle \varphi_j | \psi_n \rangle |\varphi_j\rangle
\end{aligned} \tag{2-6}$$

となる。ここで、式(2-6)の左辺第2項について、式(2-2)を考慮すると、

$$\begin{aligned}
& \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] |\psi_n\rangle - \sum_j \langle \varphi_j | \psi_n \rangle E_j |\varphi_j\rangle = E_n(\mathbf{k}) |\psi_n\rangle - E_n(\mathbf{k}) \sum_j \langle \varphi_j | \psi_n \rangle |\varphi_j\rangle \\
& \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] |\psi_n\rangle + \sum_j [E_n(\mathbf{k}) - E_j] |\varphi_j\rangle \langle \varphi_j | \psi_n \rangle = E_n(\mathbf{k}) |\psi_n\rangle
\end{aligned} \tag{2-7}$$

となる。さらに、式(2-7)の左辺第2項について、

$$V_p(\mathbf{r}) = \sum_j [E_n(\mathbf{k}) - E_j] |\varphi_j\rangle \langle \varphi_j| \tag{2-8}$$

とおくと、式(2-7)は次式のようになる。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + V_p(\mathbf{r}) \right] |\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})\rangle = E_n(\mathbf{k}) |\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})\rangle \tag{2-9}$$

ここで、エネルギー E_n は外殻電子のエネルギーである。また、 $E_n > E_j$ の関係にあるので、 $V_p > 0$ となる。さらに、ポテンシャル項は、 $V_p > V(\mathbf{r})$ の関係であるため、非常に深く、空間的に激しい変化を示す $V(\mathbf{r})$ を緩和できる[8]。ここで、ポテンシャル項を

$$V_{ps}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) + V_p(\mathbf{r}) \tag{2-10}$$

とおく。この V_{ps} が擬ポテンシャルである。 V_{ps} も周期関数であることから、これをフーリエ展開(Fourier expansion)すると、

$$V_{\text{ps}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{a}} V_{\text{ps}}(\mathbf{G}_{\mathbf{a}}) e^{i \mathbf{G}_{\mathbf{a}} \cdot \mathbf{r}} \quad (2-11)$$

が得られる。ここで、 \mathbf{G} は逆格子ベクトルである。このとき、フーリエ係数は

$$V_{\text{ps}}(\mathbf{G}_{\mathbf{a}}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int_{\Omega} V_{\text{ps}}(\mathbf{r}) e^{-i \mathbf{G}_{\mathbf{a}} \cdot \mathbf{r}} d^3 r \quad (2-12)$$

として与えられる。ここで、 Ω は単位胞体積であり、波動関数を規格化するために $1/\sqrt{\Omega}$ とした。また、結晶中の電子の波動関数も周期性を有するため、ブロッホの定理(Bloch theorem)から、

$$\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2-13)$$

と表される。ここで、 $u_{\mathbf{k}}$ は結晶格子における電子の周期関数である。 $u_{\mathbf{k}}$ のフーリエ展開とそのフーリエ係数はそれぞれ次のようになる。

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{b}} A(\mathbf{G}_{\mathbf{b}}) e^{i \mathbf{G}_{\mathbf{b}} \cdot \mathbf{r}} \quad (2-14)$$

$$A(\mathbf{G}_{\mathbf{b}}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int_{\Omega} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i \mathbf{G}_{\mathbf{b}} \cdot \mathbf{r}} d^3 r \quad (2-15)$$

また、式(2-14)を式(2-13)に代入すると次式を得る。

$$\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \sum_{\mathbf{b}} A(\mathbf{G}_{\mathbf{b}}) e^{i \mathbf{G}_{\mathbf{b}} \cdot \mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{b}} A(\mathbf{G}_{\mathbf{b}}) e^{i (\mathbf{k} + \mathbf{G}_{\mathbf{b}}) \cdot \mathbf{r}} \quad (2-16)$$

以上をまとめると、外殻電子のエネルギー $E_{\mathbf{n}}$ 求めるためには、次の 3 つの式を解けばよい。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ps}}(\mathbf{r}) \right] |\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{k}, \mathbf{r})\rangle = E_{\mathbf{n}}(\mathbf{k}) |\psi_{\mathbf{n}}(\mathbf{k}, \mathbf{r})\rangle \quad (2-17)$$

$$|\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})\rangle = \sum_{\mathbf{b}} A(\mathbf{G}_{\mathbf{b}}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}_{\mathbf{b}})\cdot\mathbf{r}} \quad (2-18)$$

$$V_{\text{ps}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{a}} V_{\text{ps}}(\mathbf{G}_{\mathbf{a}}) e^{i\mathbf{G}_{\mathbf{a}}\cdot\mathbf{r}} \quad (2-19)$$

式(2-17)に式(2-18), (2-19)を代入すると、

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\eta^2}{2m} \nabla^2 + \sum_{\mathbf{a}} V_{\text{ps}}(\mathbf{G}_{\mathbf{a}}) e^{i\mathbf{G}_{\mathbf{a}}\cdot\mathbf{r}} \right] \sum_{\mathbf{b}} A(\mathbf{G}_{\mathbf{b}}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}_{\mathbf{b}})\cdot\mathbf{r}} = E_n(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{b}} A(\mathbf{G}_{\mathbf{b}}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}_{\mathbf{b}})\cdot\mathbf{r}} \\ & \frac{\eta^2}{2m} (\mathbf{k}+\mathbf{G}_{\mathbf{b}})^2 \sum_{\mathbf{b}} A(\mathbf{G}_{\mathbf{b}}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}_{\mathbf{b}})\cdot\mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{a}} \sum_{\mathbf{b}} V_{\text{ps}}(\mathbf{G}_{\mathbf{a}}) A(\mathbf{G}_{\mathbf{b}}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}_{\mathbf{a}}+\mathbf{G}_{\mathbf{b}})\cdot\mathbf{r}} = E_n(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{b}} A(\mathbf{G}_{\mathbf{b}}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}_{\mathbf{b}})\cdot\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (2-20)$$

となる。ここで、両辺に $\frac{1}{\Omega} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{G}_{\mathbf{c}})\cdot\mathbf{r}}$ を掛け、単位胞内で積分すると、

$$\begin{aligned} & \frac{\eta^2}{2m} (\mathbf{k}+\mathbf{G}_{\mathbf{b}})^2 \sum_{\mathbf{b}} A(\mathbf{G}_{\mathbf{b}}) \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} e^{i(\mathbf{G}_{\mathbf{b}}-\mathbf{G}_{\mathbf{c}})\cdot\mathbf{r}} d^3r + \sum_{\mathbf{a}} \sum_{\mathbf{b}} V_{\text{ps}}(\mathbf{G}_{\mathbf{a}}) A(\mathbf{G}_{\mathbf{b}}) \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} e^{i\mathbf{G}_{\mathbf{a}}+\mathbf{G}_{\mathbf{b}}-\mathbf{G}_{\mathbf{c}}\cdot\mathbf{r}} d^3r \\ & = E_n(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{b}} A(\mathbf{G}_{\mathbf{b}}) \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} e^{i(\mathbf{G}_{\mathbf{b}}-\mathbf{G}_{\mathbf{c}})\cdot\mathbf{r}} d^3r \end{aligned} \quad (2-21)$$

となる。積分項において、逆格子ベクトルの性質を利用すると、次式が成立する[9]。

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} e^{i(\mathbf{G}_{\mathbf{m}}-\mathbf{G}_{\mathbf{n}})\cdot\mathbf{r}} d^3r = \delta_{\mathbf{m},\mathbf{n}} \quad (2-22)$$

式(2-22)を適用することにより、式(2-21)は次のようになる。

$$\begin{aligned} & \frac{\eta^2}{2m} \sum_{\mathbf{b}} (\mathbf{k}+\mathbf{G}_{\mathbf{b}})^2 A(\mathbf{G}_{\mathbf{b}}) \delta_{\mathbf{b},\mathbf{c}} + \sum_{\mathbf{a}} \sum_{\mathbf{b}} V_{\text{ps}}(\mathbf{G}_{\mathbf{a}}) A(\mathbf{G}_{\mathbf{b}}) \delta_{\mathbf{a},\mathbf{c}-\mathbf{b}} = E_n(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{b}} A(\mathbf{G}_{\mathbf{b}}) \delta_{\mathbf{b},\mathbf{c}} \\ & \frac{\eta^2}{2m} (\mathbf{k}+\mathbf{G}_{\mathbf{c}})^2 A(\mathbf{G}_{\mathbf{c}}) + \sum_{\mathbf{b}} V_{\text{ps}}(\mathbf{G}_{\mathbf{c}}-\mathbf{G}_{\mathbf{b}}) A(\mathbf{G}_{\mathbf{b}}) = E_n(\mathbf{k}) A(\mathbf{G}_{\mathbf{c}}) \end{aligned} \quad (2-23)$$

式(2-23)はフーリエ展開したシュレーディンガー方程式である。また、式(2-23)を行列式で表すと、

$$\begin{bmatrix}
O & & & & & \\
& a_{-c-b} & \Lambda & \Lambda & \Lambda & a_{-cb} \\
& M & O & & & M \\
& M & & a_{00} & & M \\
& M & & & O & M \\
& a_{c-b} & \Lambda & \Lambda & \Lambda & a_{cb} \\
& & & & & O
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
M \\
A(\mathbf{G}_{-c}) \\
M \\
A(\mathbf{G}_0) \\
M \\
A(\mathbf{G}_c) \\
M
\end{bmatrix}
= E_n(\mathbf{k})
\begin{bmatrix}
M \\
A(\mathbf{G}_{-c}) \\
M \\
A(\mathbf{G}_0) \\
M \\
A(\mathbf{G}_c) \\
M
\end{bmatrix}
\quad (2-24)$$

ここで、

$$a_{cb} = \begin{cases} \frac{\eta^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{G}_c)^2 & c = b \\ V_{ps}(\mathbf{G}_c - \mathbf{G}_b) & c \neq b \end{cases} \quad (2-25)$$

となる。式(2-24)の固有値解が結晶中の任意の波数ベクトル \mathbf{k} における電子エネルギーに相当する。したがって、第一ブリルアンゾーン内の各波数ベクトルに対するエネルギー固有値を求めることにより、結晶のエネルギーバンド構造を決定することができる。ただし、結晶構造によって逆格子ベクトル \mathbf{G} や擬ポテンシャル項の形が異なる。そこで、次の節では、ウルツ鉱構造に対する経験的擬ポテンシャル法と III 族窒化物半導体のエネルギーバンド構造の計算結果について述べる。

2-1-3 ウルツ鉱構造における経験的擬ポテンシャル法

GaN などの III 族窒化物半導体はウルツ鉱構造あるいは閃亜鉛鉱構造を有するが、ウルツ鉱構造の方が、閃亜鉛鉱構造に比べて、エネルギー的に安定である。図 2-2 にウルツ鉱構造 GaN の結晶構造を示す。ここで、右図は各水平面での格子原子(Ga)の位置を示し、また、 a , c はそれぞれ c 軸に垂直および平行方向の格子定数、 \mathbf{l} , \mathbf{m} , そして \mathbf{n} は結晶内の基本並進ベクトルである。ここで、基本並進ベクトルは

$$\begin{aligned}
\mathbf{l} &= (a, 0, 0) \\
\mathbf{m} &= \left(\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}a}{2}, 0 \right) \\
\mathbf{n} &= (0, 0, c)
\end{aligned} \quad (2-26)$$

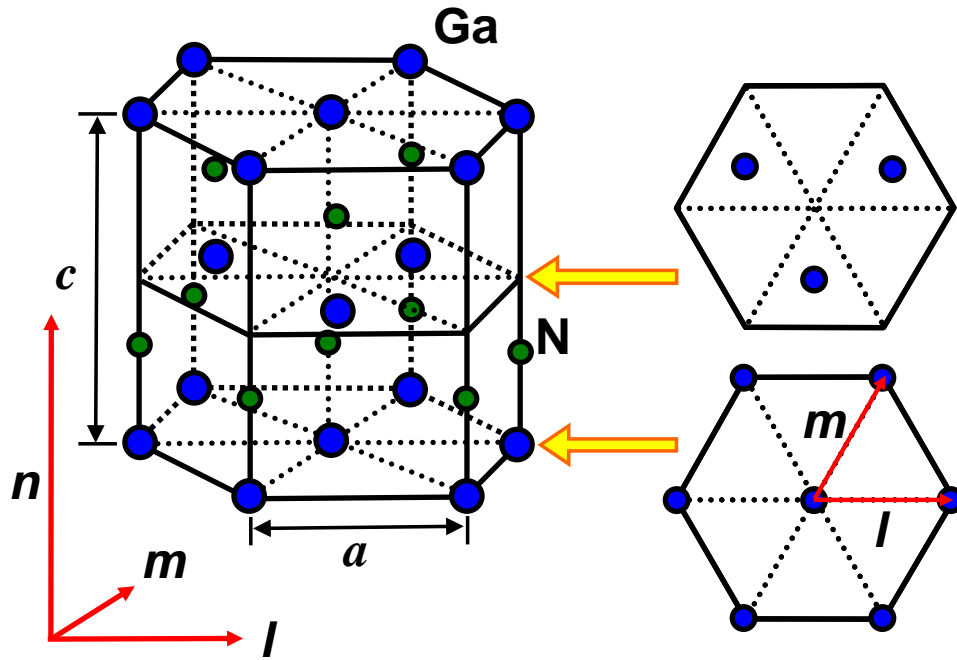


図 2-2 ウルツ鉱構造 GaN の結晶構造

であり、単位体積 V は

$$V = l \cdot (m \times n) = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c \quad (2-27)$$

となる。また、基本逆格子ベクトル l^*, m^*, n^* は、それぞれ、

$$\begin{aligned} l^* &= 2\pi \frac{m \times n}{V} \\ &= \left(\frac{2\pi}{a}, -\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, 0 \right) \\ m^* &= 2\pi \frac{n \times l}{V} \\ &= \left(0, \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}, 0 \right) \\ n^* &= 2\pi \frac{l \times m}{V} \\ &= \left(0, 0, \frac{2\pi}{c} \right) \end{aligned} \quad (2-28)$$

で与えられる。

したがって、逆格子ベクトル \mathbf{G} は次式のように表される。

$$\mathbf{G} = A_1 \mathbf{l}^* + A_2 \mathbf{m}^* + A_3 \mathbf{n}^* \quad (2-29)$$

ここで、 A_1, A_2, A_3 は整数である。球対称の原子を充填した理想的な構造であるとき、格子定数の軸率は $c = \sqrt{8/3} a$ となることを考慮すると、逆格子ベクトル長さは短い順に次のように分けられる。

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(0) &= 0 \\ \mathbf{G}(3/4) &= (0, 0, \pm 1) \\ \mathbf{G}(8/3) &= (\pm 1, 0, 0), (1, 1, 0), (-1, -1, 0) \\ \mathbf{G}(3) &= (0, 0, \pm 2) \\ &\vdots \end{aligned} \quad (2-30)$$

ここで、左辺()内の数字は \mathbf{G} の長さを意味し、また、 \mathbf{G} の長さは $(\sqrt{2}\pi/a)^2$ で規格化した。

図 2-3 にウルツ鉱構造 GaN の単位胞を示す。ここで、 $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4$ は単位胞内に存在する各原子の位置ベクトルである。GaN の場合、単位胞内には、各々 2 個の Ga ($\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3$) と N ($\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_4$) 原子が含まれる。ここで、 $\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3$ の原子の中心を基準点とすると、それぞれの位置ベクトルは、

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1 &= \left[-\frac{1}{6}, -\frac{1}{6}, -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + u \right) \right] \\ \mathbf{r}_3 &= \left[+\frac{1}{6}, +\frac{1}{6}, +\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - u \right) \right] \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{r}_3 \end{aligned}} \right\} : \text{Ga}, \quad (2-31)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_2 &= \left[-\frac{1}{6}, -\frac{1}{6}, -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - u \right) \right] \\ \mathbf{r}_4 &= \left[+\frac{1}{6}, +\frac{1}{6}, +\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + u \right) \right] \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} \mathbf{r}_2 \\ \mathbf{r}_4 \end{aligned}} \right\} : \text{N}$$

となる。ここで、 $u = \frac{3}{8}c$ である。したがって、ウルツ鉱構造結晶の擬ポテンシャル V_{ps} のフ

ーリエ係数は、4 つのポテンシャルを考慮して、

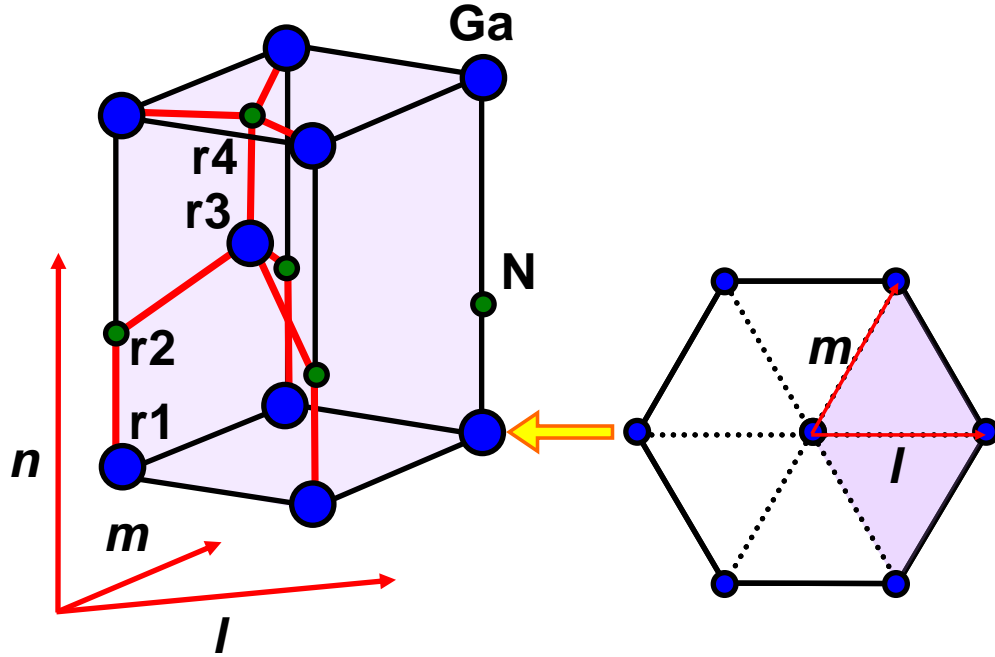


図 2-3 ウルツ鉱構造 GaN の単位胞

$$\begin{aligned}
 V_{ps}(\mathbf{G}) &= \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} [V_1(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1) + V_2(\mathbf{r}-\mathbf{r}_2) + V_3(\mathbf{r}-\mathbf{r}_3) + V_4(\mathbf{r}-\mathbf{r}_4)] e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} d^3r \\
 &= e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_1} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V_1(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} d^3r + e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_2} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V_2(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} d^3r \\
 &\quad + e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_3} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V_3(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} d^3r + e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_4} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V_4(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} d^3r
 \end{aligned} \tag{2-32}$$

として表される。ここで、オイラーの公式(Euler's formula)を適用すると、式(2-32)の右辺第1項は、

$$e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_1} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V_1(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} d^3r = [\cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_1) - i \sin(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_1)] \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V_1(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} d^3r \tag{2-33}$$

となる。さらに、 $[\cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_1) - i \sin(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_1)]$ に対して、式(2-29), (2-31)を代入すると、

$$\begin{aligned}
& \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_1) - i \sin(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_1) \\
&= \cos \left[2\pi \left(-\frac{A_1}{6} - \frac{A_2}{6} - \frac{A_3}{4} - \frac{A_3}{2} u \right) \right] - i \sin \left[2\pi \left(-\frac{A_1}{6} - \frac{A_2}{6} - \frac{A_3}{4} - \frac{A_3}{2} u \right) \right]
\end{aligned} \tag{2-34}$$

となり、式(2-34)の右辺第1項、第2項はそれぞれ、

$$\begin{aligned}
(\text{右辺第1項}) &= \cos \left[2\pi \left(-\frac{A_1}{6} - \frac{A_2}{6} - \frac{A_3}{4} - \frac{A_3}{2} u \right) \right] \\
&= \cos \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) + \pi A_3 u \right] \\
&= \cos \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \cos(\pi A_3 u) - \sin \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \sin(\pi A_3 u)
\end{aligned} \tag{2-35}$$

$$\begin{aligned}
(\text{右辺第2項}) &= -i \sin \left[2\pi \left(-\frac{A_1}{6} - \frac{A_2}{6} - \frac{A_3}{4} - \frac{A_3}{2} u \right) \right] \\
&= i \sin \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) + \frac{A_3}{2} u \right] \\
&= i \sin \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \cos(\pi A_3 u) + i \cos \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \sin(\pi A_3 u)
\end{aligned} \tag{2-36}$$

となる。したがって、式(2-32)の右辺第1項は、最終的に次式となる。

$$\begin{aligned}
& e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_1} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V_1(\mathbf{G}) e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} d^3 r \\
&= V_1^* \left\{ \cos \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \cos(\pi A_3 u) - \sin \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \sin(\pi A_3 u) \right. \\
&\quad \left. + i \sin \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \cos(\pi A_3 u) + i \cos \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \sin(\pi A_3 u) \right\}
\end{aligned} \tag{2-37}$$

ここで、

$$V_1^* = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V_1 e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} d^3 r \tag{2-38}$$

である。また、同様の計算によって、式(2-32)の右辺第2,3,および4項はそれぞれ、

$$\begin{aligned}
& e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}_2} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V_2(\mathbf{G}) e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} d^3r \\
& = V_2^* \left\{ \cos \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \cos(\pi A_3 u) + \sin \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \sin(\pi A_3 u) \right. \\
& \quad \left. + i \sin \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \cos(\pi A_3 u) - i \cos \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \sin(\pi A_3 u) \right\}
\end{aligned} \tag{2-39}$$

$$\begin{aligned}
& e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}_3} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V_3(\mathbf{G}) e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} d^3r \\
& = V_3^* \left\{ \cos \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \cos(\pi A_3 u) + \sin \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \sin(\pi A_3 u) \right. \\
& \quad \left. - i \sin \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \cos(\pi A_3 u) + i \cos \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \sin(\pi A_3 u) \right\}
\end{aligned} \tag{2-40}$$

$$\begin{aligned}
& e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}_4} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V_4(\mathbf{G}) e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} d^3r \\
& = V_4^* \left\{ \cos \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \cos(\pi A_3 u) - \sin \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \sin(\pi A_3 u) \right. \\
& \quad \left. - i \sin \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \cos(\pi A_3 u) - i \cos \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \sin(\pi A_3 u) \right\}
\end{aligned} \tag{2-41}$$

ここで、

$$V_2^* = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V_2 e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} d^3r \tag{2-42}$$

$$V_3^* = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V_3 e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} d^3r \tag{2-43}$$

$$V_4^* = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V_4 e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} d^3r \tag{2-44}$$

である。以上の結果から、式(2-32)は次式のように、

$$V_{ps}(\mathbf{G}) = V_{ps}^s(\mathbf{G}) \cos \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \cos(\pi u n) \\ + i V_{ps}^a(\mathbf{G}) \cos \left[2\pi \left(\frac{A_1}{6} + \frac{A_2}{6} + \frac{A_3}{4} \right) \right] \sin(\pi u n) \quad (2-45)$$

ここで、

$$V_{ps}^s(\mathbf{G}) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} [(V_1 + V_3) + (V_2 + V_4)] e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} d^3r \quad (2-46)$$

$$V_{ps}^a(\mathbf{G}) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} [(V_1 + V_3) - (V_2 + V_4)] e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} d^3r \quad (2-47)$$

としてまとめることができる。ここで、経験的擬ポテンシャル法では、式(2-46)と式(2-47)の擬ポテンシャルのフーリエ成分 V_{ps}^s (対称成分)と V_{ps}^a (非対称成分)に対して、実験結果を再現できる数値を適用する。そして、通常、式(2-30)で示した逆格子ベクトルの長さごとに、対称成分 V_{ps}^s と非対称成分の V_{ps}^a の値(擬ポテンシャルパラメータ)をそれぞれ定義する。式(2-45)および定義したパラメータを式(2-25)のポテンシャル項に代入し、式(2-24)の固有値解を求めることにより、任意の波数ベクトルに対する電子のエネルギーが得られる。ただし、式(2-24)から分かるように、求めるべき行列は無限次元であるため、直接的な数値計算は困難である。しかし、経験的擬ポテンシャル法では、比較的少ない次元を考慮した場合でも、固有値解が収束することが特徴である。実際に、 147×147 程度の行列を用いることにより、十分な収束結果が得られる。一方、擬ポテンシャルパラメータの対称成分と非対称成分については、それぞれ 15 のパラメータを考慮することにより、エネルギー固有値を計算することが可能である。表 2 に、ウルツ鉱構造 GaN の擬ポテンシャルパラメータを示す[6]。ここで、ポテンシャルの単位はリュードベリである。

$$1[\text{Ry}] = 13.6 [\text{eV}] \quad (2-48)$$

以上のような計算方法を用いることにより、半導体のエネルギーバンド構造を計算することができる。経験的擬ポテンシャル法によって計算した窒化物半導体 GaN, InN と AlN のエネルギーバンド構造を以下に示す。

(i) ウルツ鉱構造 GaN のエネルギーバンド構造

図 2-4 に(a) ウルツ鉱構造 GaN のエネルギーバンド構造と(b) 第一ブリルアンゾーンを示す。ここで、伝導帯の最下点をエネルギーの基準($E=0$)とした。図 2-4 (a)において、数字はバンド指数を意味する。伝導帯では、各波数ベクトルに対して低いエネルギー状態から順にバンド指数 1, 2, ..., 6 とし、一方、価電子帯では、高いエネルギー状態から順にバンド指

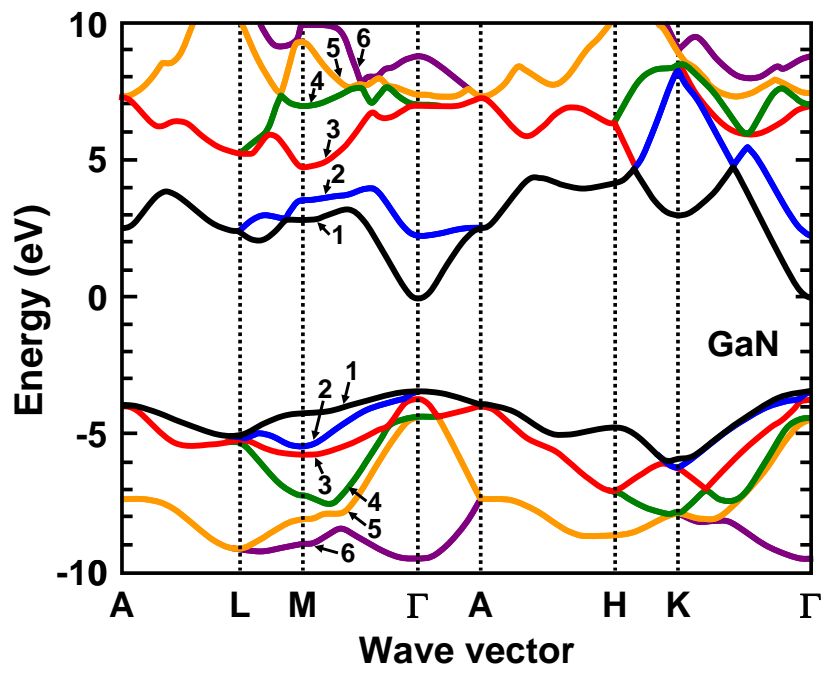
数 1, 2, ..., 6 とした。また、ここまでは、エネルギー E_n は波数ベクトルの関数のみで示されてきたが、(2-1-5)節以降では、バンド指数も関数として含める。すなわち、

$$E(\mathbf{k}) \rightarrow E(i_c, \mathbf{k}) \quad (2-49)$$

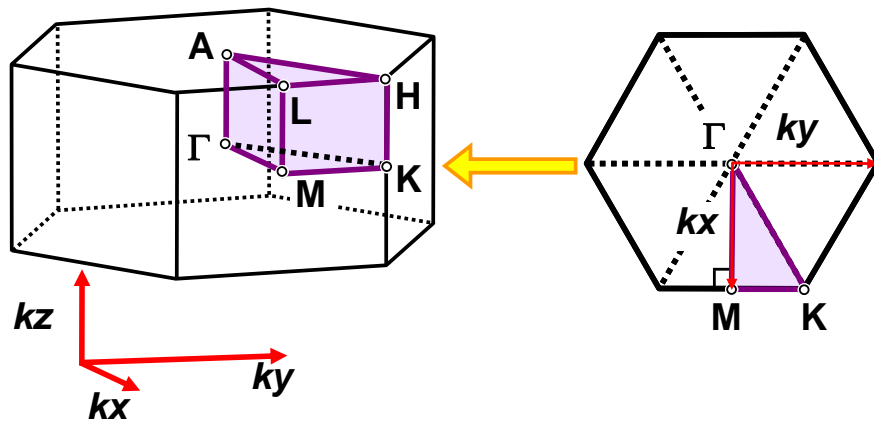
として表現する。ここで、 i_c は伝導帯内のバンド指数であり、価電子帯の場合は i_v とする。また、図 2-4 (a)中の横軸は対称性の高い波数ベクトルの点を表している。これら対称性の高い点は図 2-4 (b)で示される点に対応している。計算において、Oğuzman らが報告した擬ポテンシャルパラメータを用いたので[6]、彼らの計算と同様に、伝導帯のエネルギーを 0.92 eV 価電子帯側へシフトさせた。これは電子の有効質量が実験値と合うように擬ポテンシャルパラメータが決定されており、エネルギーバンドギャップの値も実験値と合うようにするための調整である。この結果、有効質量は 0.2、 Γ 点のバンドギャップは 3.4 eV が得られた。また、図 2-5 に運動量空間内の(a) $kx-ky$ 平面上および(b) $kx-kz$, $ky-kz$ 平面上の伝導帯中のバンド指数 1 の電子エネルギー分布を示す。 $kx-ky$ 平面上のエネルギー分布では、 Γ 点を中心として、エネルギーが円状に広がることが分かる。一方、 $kx-kz$, $ky-kz$ 平面では、楕円状に広がるエネルギー分布が確認できる。つまり、ウルツ鉱構造 GaN は Γ 点近傍で面方位依存性を有する。また、図 2-4 (b)に示した BZ 内の三角柱に沿って、エネルギー分布が対称であることが図 2-5 で確認できる。この三角柱が対称性を考慮した場合の最小還元領域に相当する。

表 2-1 GaN の擬ポテンシャルパラメータ[6]

$ \mathbf{G} ^2 \left[\left(\frac{\sqrt{2}\pi}{a} \right)^2 \right]$	V^s [Ry]	V^a [Ry]
$\frac{3}{4}$	0	0
$2\frac{2}{3}$	-0.38	0
3	-0.34	0.26
$3\frac{5}{12}$	-0.28	0.25
$5\frac{2}{3}$	-0.09	0.16
$6\frac{3}{4}$	0	0
8	0.04	0
$8\frac{3}{4}$	0	0
$9\frac{5}{12}$	0.08	0.06
$10\frac{2}{3}$	0.06	0
11	0.06	0.016
$11\frac{5}{12}$	0.055	0.014
12	0	0.012
$13\frac{2}{3}$	0.05	0.01
$14\frac{2}{3}$	0	0.01

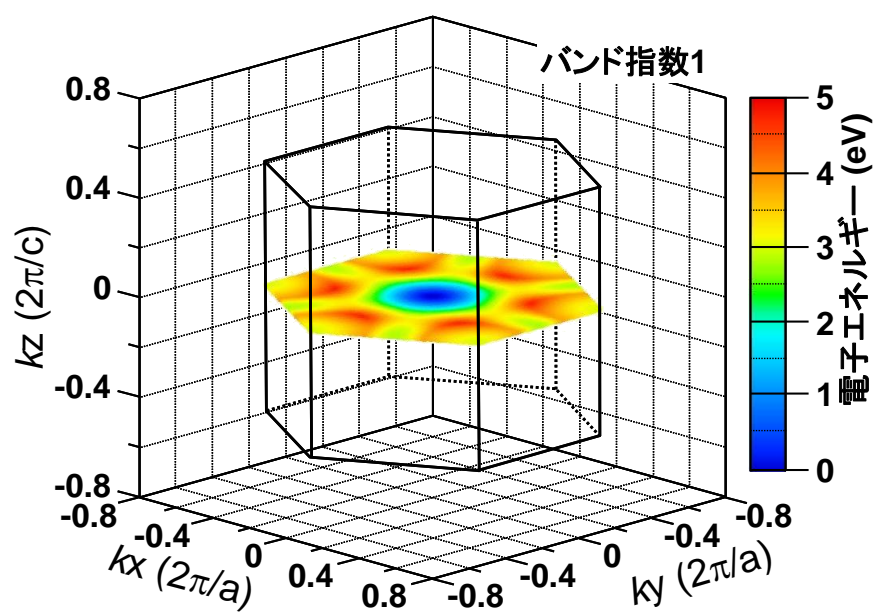


(a)

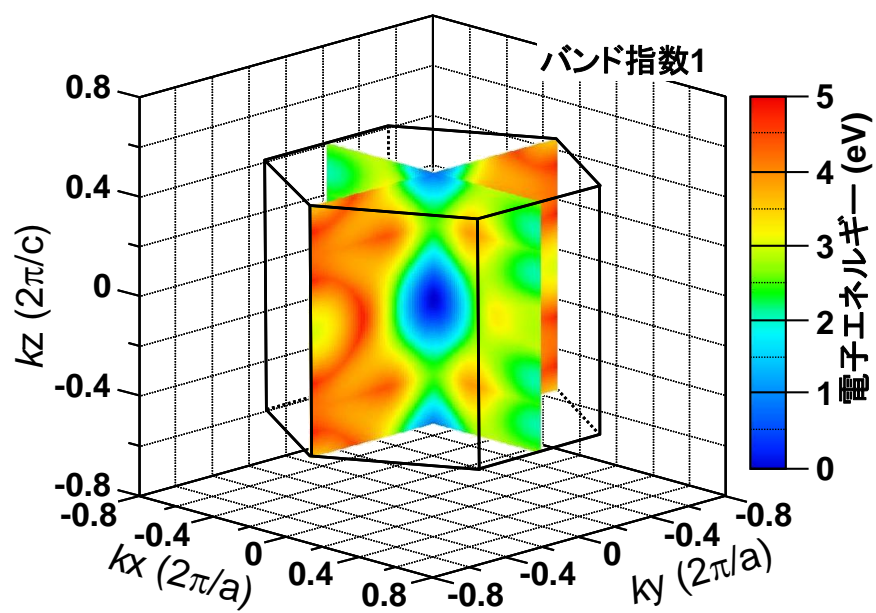


(b)

図 2-4 (a) 経験的擬ポテンシャル法によるウルツ鉱構造 GaN のエネルギーバンド構造と(b) 第一ブリルアンゾーンと対称性の高い波数ベクトルの点



(a)



(b)

図 2-5 運動量空間内の(a) k_x - k_y 平面上および(b) k_x - k_z , k_y - k_z 平面上の伝導帯中のバンド指数 1 の電子エネルギー分布

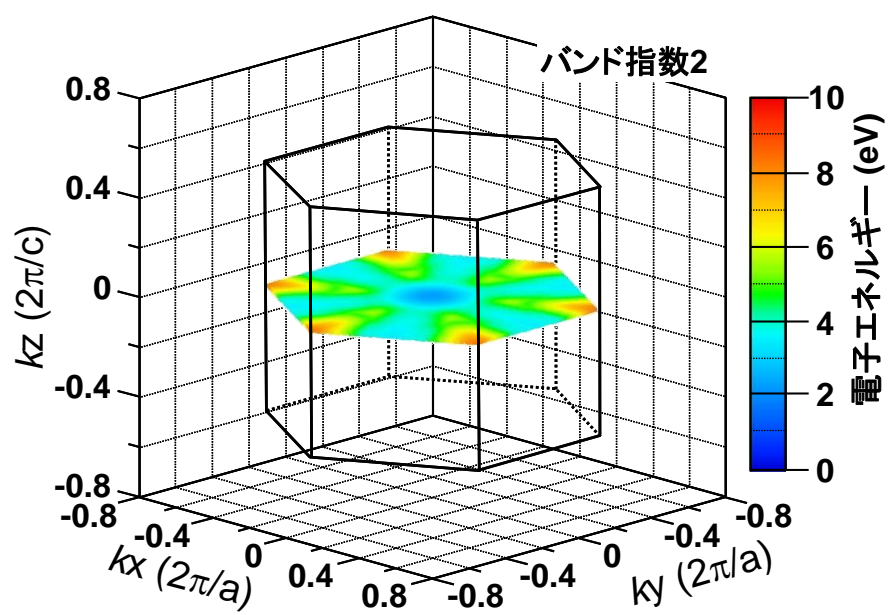
図 2-6 に運動量空間内の(a) $kx-ky$ 平面上および(b) $kx-kz, ky-kz$ 平面上の伝導帯中のバンド指数 2 の電子エネルギー分布を示す。バンド指数 2 においても、 $kx-ky$ 平面のエネルギー分布では、 Γ 点を中心とした円状のエネルギー分布が確認できる。しかし、 Γ -A 方向では、ほぼ一定のエネルギー分布であった(図 2-6 (b))。また、バンド指数 2 では、図 2-6 (a)から分かるように、六角形の頂点(すなわち、K 点)の波数ベクトルが最も高いエネルギーを示すことが分かった。

(ii) ウルツ鉱構造 InN のエネルギーバンド構造

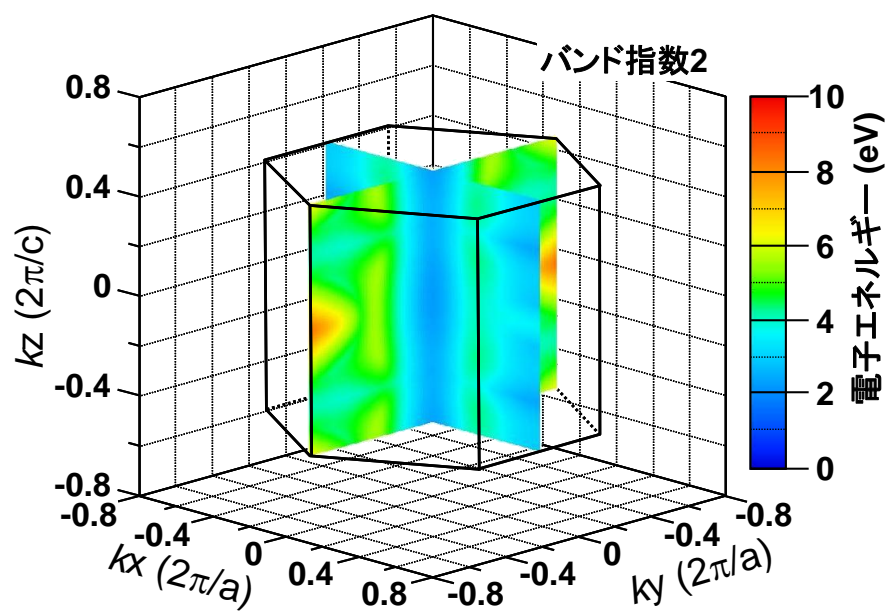
ウルツ鉱構造 InN の擬ポテンシャルパラメータを記した報告例がなかったので、本研究では、ウルツ鉱構造 InN の擬ポテンシャルパラメータを独自に決定した。導出する際、計算したエネルギーバンド構造の有効質量とバンドギャップがそれぞれ実験値の有効質量(0.1)とバンドギャップ(0.7 eV)を再現できることに重点を置いた[10]。また、InN のパラメータは、ウルツ鉱構造 GaN の擬ポテンシャルパラメータを軸にして、GaN の各パラメータを調整することにより決定した。調整する度にバンド構造の計算を行い、計算結果の有効質量とバンドギャップが 0.1 と 0.7 eV を同時に満たすまで調整を繰り返した。また、GaN のバンド構造の計算で行った伝導帯のエネルギーバンド構造を 0.92 eV 価電子帯側へシフトする操作は維持したままである。導出したウルツ鉱構造 InN の擬ポテンシャルパラメータを表 2-2 にまとめる。また、図 2-7 にウルツ鉱構造 InN のエネルギーバンド構造を示す。ここで、エネルギーの基準は InN の伝導帯の最下点とした。計算結果は 0.1 の有効質量と 0.7 eV のバンドギャップを示した。

(iii) ウルツ鉱構造 AlN のエネルギーバンド構造

ウルツ鉱構造 AlN についても、ウルツ鉱構造 InN の場合と同様に、擬ポテンシャルパラメータを記した報告例が見当たらなかった。そのため、ウルツ鉱構造 AlN の擬ポテンシャルパラメータも InN と同様の方法で導出した。ここで、目標とした実測データは、有効質量が 0.3、バンドギャップが 6.1 eV である[10]。AlN のバンド構造の計算においても、伝導帯のエネルギーバンド構造を 0.92 eV 価電子帯側へシフトする操作は維持したままである。表 2-3 に導出したウルツ鉱構造 AlN の擬ポテンシャルパラメータをまとめる。また、図 2-8 にウルツ鉱構造 AlN のエネルギーバンド構造を示す。ここで、エネルギーの基準は AlN の伝導帯の最下点とした。計算結果は 0.3 の有効質量と 6.1 eV のバンドギャップを示した。AlN は、InN や GaN に比べて、より大きなバンドギャップを有するが、伝導帯中の最下点の Γ 点と L-M 間に存在する谷の底とのエネルギー差、あるいは Γ 点と K 点のエネルギー差については、AlN のものが InN や GaN のものに比べ、小さいことが分かった。



(a)



(b)

図 2-6 運動量空間内の(a) k_x - k_y 平面および(b) k_x - k_z , k_y - k_z 平面上のバンド指数 2 のエネルギー分布

表 2-2 InN の擬ポテンシャルパラメータ

$ G ^2 \left[\left(\frac{\sqrt{2}\pi}{a} \right)^2 \right]$	V^s [Ry]	V^a [Ry]
$\frac{3}{4}$	0	0
$2\frac{2}{3}$	-0.35	0
3	-0.255	0.21
$3\frac{5}{12}$	-0.22	0.175
$5\frac{2}{3}$	-0.06	0.12
$6\frac{3}{4}$	0	0
8	0.025	0
$8\frac{3}{4}$	0	0
$9\frac{5}{12}$	0.04	0.03
$10\frac{2}{3}$	0.03	0
11	0.02	0.016
$11\frac{5}{12}$	0.015	0.014
12	0	0.012
$13\frac{2}{3}$	0.01	0.01
$14\frac{2}{3}$	0	0.01

表 2-3 AlN の擬ポテンシャルパラメータ

$ \mathbf{G} ^2 \left[\left(\frac{\sqrt{2}\pi}{a} \right)^2 \right]$	V^s [Ry]	V^a [Ry]
$\frac{3}{4}$	0	0
$2\frac{2}{3}$	-0.37	0
3	-0.325	0.265
$3\frac{5}{12}$	-0.3	0.25
$5\frac{2}{3}$	-0.08	0.17
$6\frac{3}{4}$	0	0
8	0.105	0
$8\frac{3}{4}$	0	0
$9\frac{5}{12}$	0.12	0.01
$10\frac{2}{3}$	0.09	0
11	0.08	0.016
$11\frac{5}{12}$	0.075	0.014
12	0	0.012
$13\frac{2}{3}$	0.07	0.01
$14\frac{2}{3}$	0	0.01

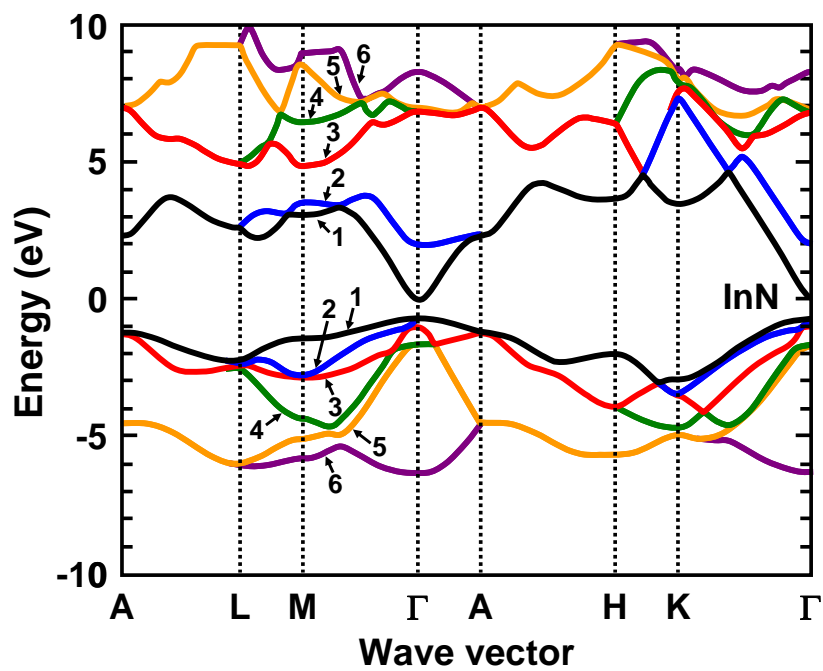


図 2-7 ウルツ鉱構造 InN のエネルギーバンド構造

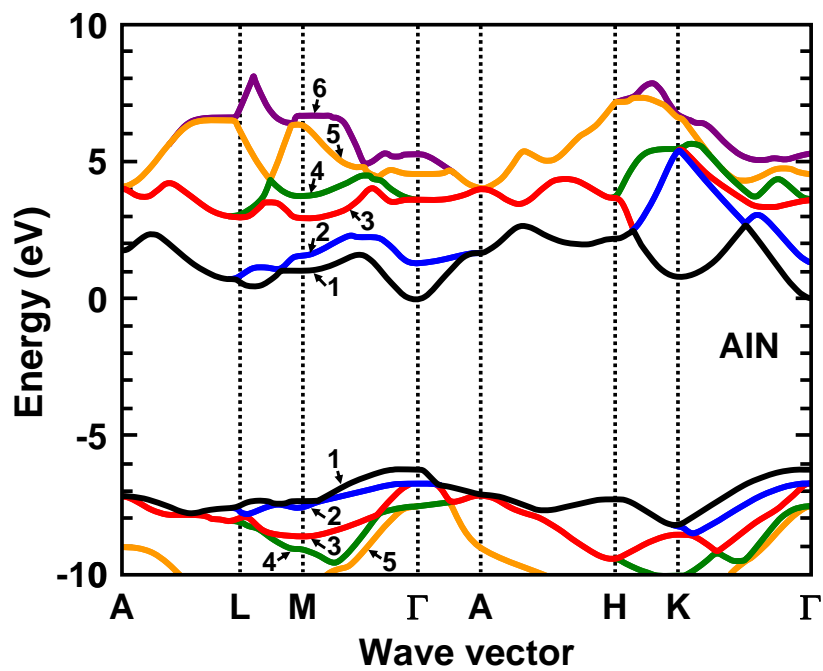


図 2-8 ウルツ鉱構造 AlN のエネルギーバンド構造

(iii) 三元混晶半導体のエネルギーバンド構造

AlGa_xN, InGa_xNあるいはAlIn_xNといったIII族窒化物半導体の三元混晶系に対するエネルギーバンド構造の計算において、その擬ポテンシャルパラメータは仮想結晶近似(virtual crystal approximation)を考慮して、2元素半導体各々の擬ポテンシャルパラメータを用いることにより決定した[11]。例えば、AlGa_xNの場合、AlNとGa_xNの擬ポテンシャルパラメータを線形補間する。すなわち、Al_xGa_{1-x}Nの擬ポテンシャルパラメータ、 $V^s_{\text{AlGa}_x\text{N}}$ および $V^a_{\text{AlGa}_x\text{N}}$ はそれぞれ、

$$V^s_{\text{AlGa}_x\text{N}}(G) = xV^s_{\text{AlN}}(G) + (1-x)V^s_{\text{Ga}_x\text{N}}(G) \quad (2-50)$$

$$V^a_{\text{AlGa}_x\text{N}}(G) = xV^a_{\text{AlN}}(G) + (1-x)V^a_{\text{Ga}_x\text{N}}(G) \quad (2-51)$$

で与えられる。図 2-9 に計算した AlGa_xN についての伝導帯のバンド指数 1 のエネルギーバンド構造を示す。ここで、計算した AlGa_xN は Al 組成が低い順に GaN(赤), Al_{0.25}Ga_{0.75}N(緑), Al_{0.25}Ga_{0.25}N(青), Al_{0.75}Ga_{0.25}N(紫), AlN(黒)である。線形補間した擬ポテンシャルパラメータに基づいてバンド計算を行った場合、計算したバンド構造も線形的に変化する。この傾向は、Ando らが比較した GaN と AlGa_xN のエネルギーバンド構造の計算結果と一致する[12]。

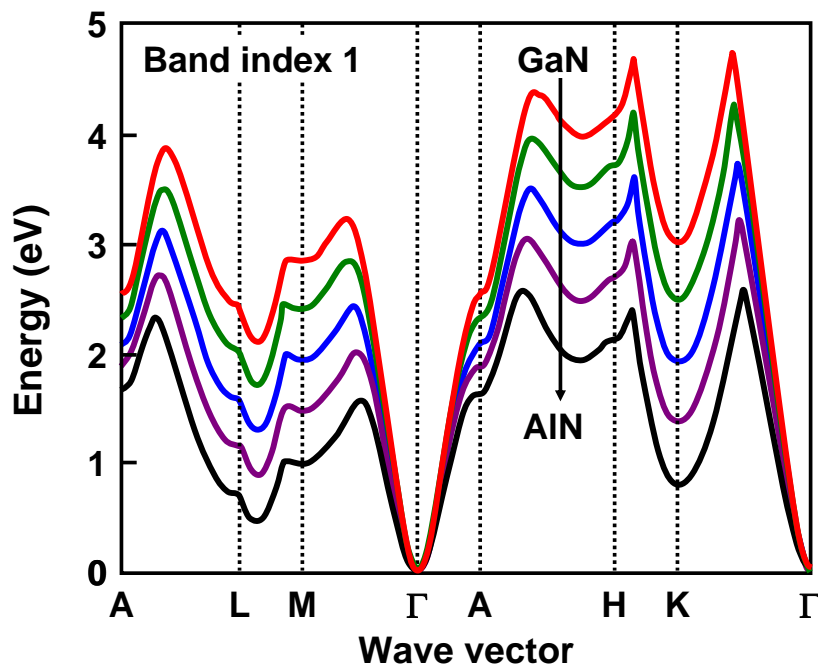


図 2-9 AlGa_xN のエネルギーバンド構造

2-1-4 フルバンド構造計算のプログラム

ここでは、経験的擬ポテンシャル法に基づいたエネルギーバンド構造の計算プログラムについて述べる。図 2-10 にフルバンド構造計算のプログラムのフローチャートを示す。

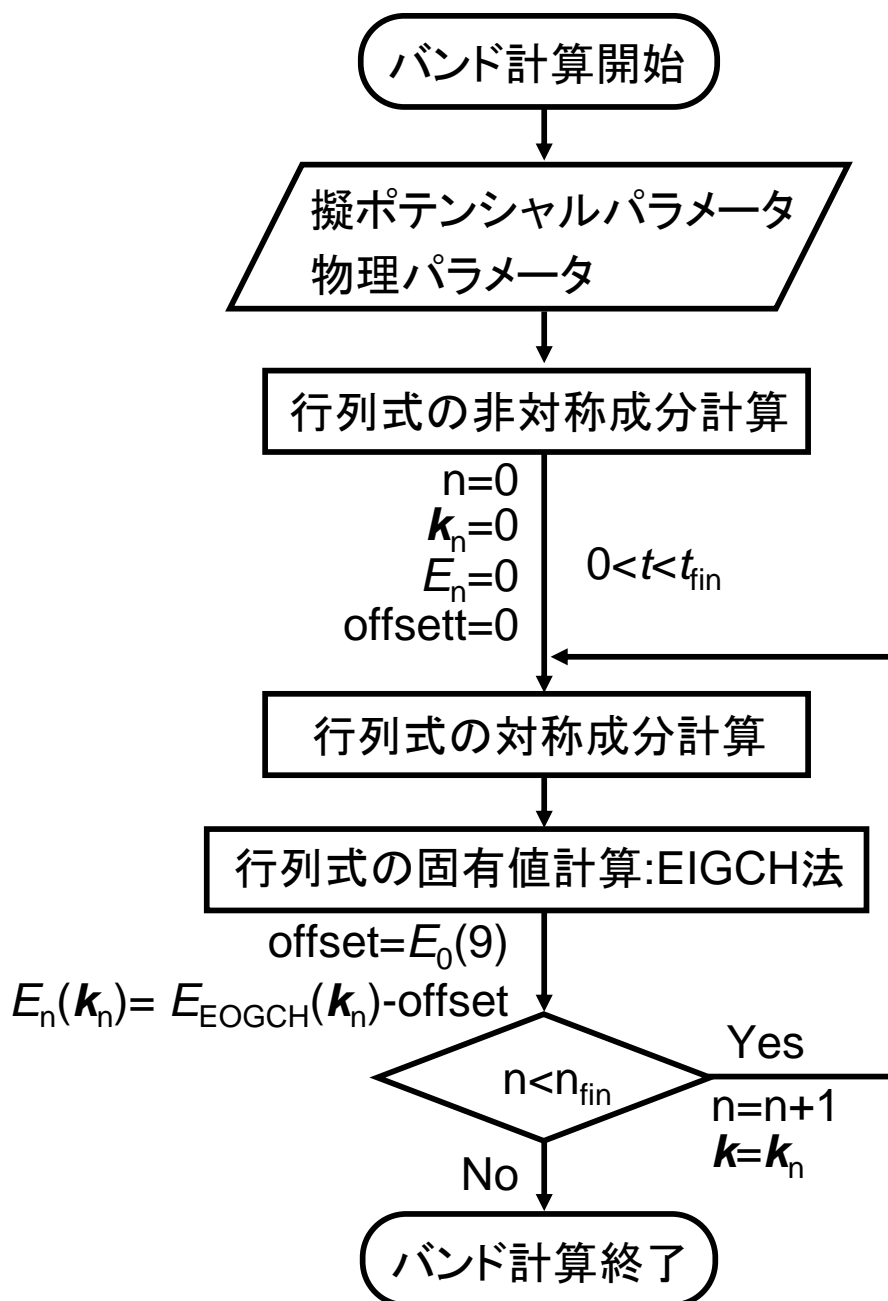


図 2-10 フルバンド構造の計算プログラムのフローチャート

フローチャートについての説明を以下に示す。 n は計算する電子状態の数, \mathbf{k}_n は波数ベクトル, E_n は電子エネルギー, offset は基準エネルギーである。

(i) 擬ポテンシャルパラメータや格子定数などの物理パラメータと逆格子ベクトルの読み込みを行う。

(ii) 読み込んだ擬ポテンシャルパラメータと逆格子ベクトルを用いて、式(2-24), (2-25)で示した行列式の非対角要素($c \neq b$ のときの成分)を決定する。

(iii) 波数ベクトル $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ (Γ 点)を初期の電子状態として設定する。

この設定は、エネルギーの基準点(プログラム中 "offset")を定義するために行う。本研究では、エネルギーバンド構造(図 2-4(a), 2-7, 2-8)およびエネルギー分布(図 2-5, 2-6)のように、伝導帯の最下点を基準(すなわち、 $E=0$)とした。この場合、 offset は固有値計算で求めたエネルギー固有値の 9 行目の値に設定する。

(iv) 定義した波数ベクトルに対する固有値計算を行う。

(iv^{*1}) 式(2-24)と(2-25)で示した行列式の対角要素($c=b$ のときの成分)を決定する。

(iv^{*2}) (ii)および(iv^{*1})の操作で定義した行列式要素の非対角要素と対角要素を用いて、固有値計算を行う。固有値計算の手法は数値計算プログラム[13]を参照した。

(v) 第一ブリルアンゾーン内の任意の波数ベクトルに対して、(iv)の操作を繰り返す。例えば、図 2-4 (a)で示したバンド構造のプロットを得るためには、波数ベクトル \mathbf{k}_n を(a) A-L, (b) L-M, (c) M- Γ , (d) Γ -A, (e) A-H, (f) H-K, (g) K- Γ 間でそれぞれ離散的に選択し、それぞれの波数ベクトルに対して固有値計算を行う。ここで、選択した波数ベクトルは、(a) A-L, (b) L-M, ..., (g) K- Γ 間をそれぞれ 100 分割したものに相当する。計算したエネルギー固有値と波数ベクトルをプロットすることで図 2-4 (a)で示したバンド構造を描くことができる。ここで、対称性の高い点に対する波数ベクトルはそれぞれ次の通りである。

$$\begin{aligned} \text{A:} & \left(0, 0, \frac{1}{2}\right), & \text{L:} & \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, 0, \frac{1}{2}\right), & \text{M:} & \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, 0, 0\right) \\ \Gamma: & (0, 0, 0), & \text{H:} & \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right), & \text{K:} & \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{3}, 0\right) \end{aligned} \quad (2-52)$$

2-1-5 電子の状態密度

エネルギーバンド構造に加えて、状態密度は(2-2)節で説明する散乱確率を計算するために必要である。状態密度は微小エネルギー領域 δE に存在する電子状態数として定義される物理量である。状態密度の計算は、経験的擬ポテンシャル法で計算したエネルギーバンド構造を用いることにより、次式のように表される[14]。

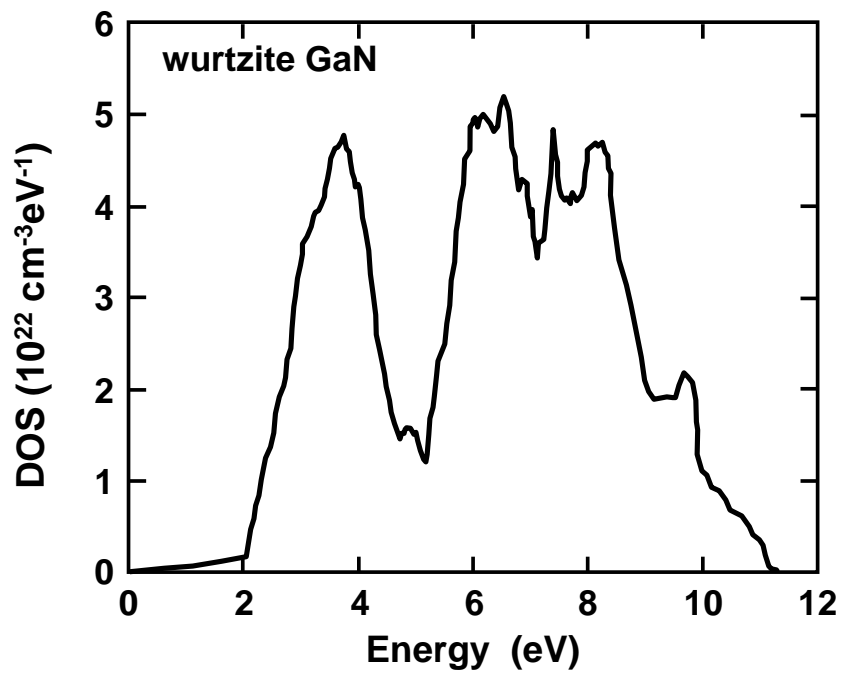
$$D(E) = \frac{V}{N_a} \sum_k \sum_{i_c} \delta[E - E(i_c, \mathbf{k})] \quad (2-53)$$

ここで、 D は状態密度、 V は固体の体積、 N_a は第一ブリルアンゾーンの単位体積あたりの原子数である。図 2-11 (a)に計算したウルツ鉱構造 GaN の状態密度の電子エネルギー依存性を示す。GaN の状態密度(DOS)は 2 eV 付近で急激に増加する。伝導帯の 6 つのバンド指数を考慮した場合、状態密度のピーク値は 6.6 eV において $5.2 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ である。また、図 2-11 (b)に各バンド指数に対する規格化した状態密度のエネルギー依存性を示す。規格化した状態密度(D_{nor})は、式(2-54)によって計算される各バンド指数(i_c)の状態密度を、式(2-53)で計算した状態密度で割ることによって決定される(式(2-55))。

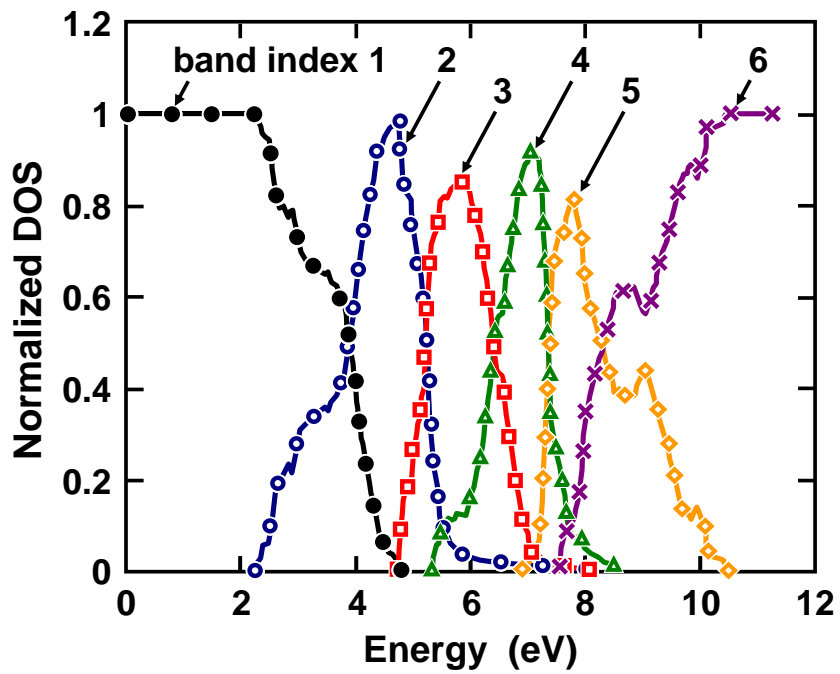
$$D(i_c, E) = \frac{V}{N_a} \sum_k \delta[E - E(i_c, \mathbf{k})] \quad (2-54)$$

$$D_{\text{nor}}(i_c, E) = \frac{D(i_c, E)}{D(E)} \quad (2-55)$$

図 2-11 (b)に示されるように、各電子エネルギーで支配的な D_{nor} はエネルギーの増加に伴って、高いバンド指数へ移る。例えば、3 eV 以下では、バンド指数 1 の D_{nor} が支配的な電子状態である。一方、5-6 eV では、バンド指数 2 の D_{nor} が支配的な電子状態であることが分かる。



(a)



(b)

図 2-11 (a) 計算したウルツ鉱構造 GaN の状態密度のエネルギー依存性と
(b) バンド指数ごとの規格化した状態密度のエネルギー依存性

2-2 散乱確率

2-2-1 はじめに

電子が結晶内を運動するとき、フォノン振動や不純物原子などの影響を受け、その電子状態を変化させる。そのため、電子輸送解析およびデバイス解析を行う上で、散乱機構もエネルギーバンド構造と同様に重要な物理パラメータである。たとえば、GaN を異種基板上に結晶成長したときに生じる欠陥に関連した転位散乱を考慮するか否かにより、実験結果の解釈に大きな違いがあることが指摘されている[15]。ここでは、各散乱機構について、遷移確率をエネルギーバンド構造および状態密度を用いて計算する手法を述べる。特に、フルバンド構造を考慮することによって、正確な計算が可能となる衝突イオン化過程について詳しく記述する。

2-2-2 有極性光学フォノン散乱

III 族窒化物半導体(GaN, AlN など)の単位胞内には異種の原子が存在する(GaN の場合は Ga と N 原子)。そのため、隣接した原子が交互に反対方向に変位する光学振動を起こしたとき、相対変位による分極が誘起される。この光学モードのフォノン散乱を有極性光学フォノン散乱という。低電界下で、有極性光学フォノン散乱が最も支配的な散乱機構である[16]。また、異方性を有するウルツ鉱構造結晶の場合、光学フォノン散乱は縦方向(LO-like)と横方向(TO-like)の光学フォノンモードに分けられる。本論文では、両光学フォノンモードを考慮する。この散乱機構によって波数ベクトル \mathbf{k} が \mathbf{k}' に遷移する確率 S_{POP} はフェルミの黄金律により、

$$\begin{aligned} S_{\text{POP}}(i_c, \mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{2\pi}{\eta} |C(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 |I_0(i_c, \mathbf{k} | i_c', \mathbf{k}')|^2 \delta[E(i_c', \mathbf{k}') - E(i_c, \mathbf{k}) \pm \eta\omega_0] \left(N + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \\ &= \frac{2\pi}{\eta} |C(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 |I_0(i_c, \mathbf{k} | i_c', \mathbf{k}')|^2 D(i_c', \mathbf{k}') \left(N + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (2-56)$$

として与えられる[17]。ここで、 I_0 は \mathbf{k} - \mathbf{k}' の重なり積分、 N はフォノンの占有数、 C は電子-フォノン相互作用結合係数、 $\hbar\omega_0$ はフォノンエネルギーである。また、 \pm の符号について、 $+$ 符号と $-$ 符号はそれぞれ、電子とフォノンの相互作用の放出過程および吸収過程に相当する。放出過程は電子がフォノンにエネルギーを与える過程であり、吸収過程は電子がフォノンからエネルギーを受け取る過程である。また、状態密度(D)は、式(2-54)で示したバンド

指数(i_c)と波数ベクトル(\mathbf{k})に依存するものを適用する。また、 \mathbf{k} - \mathbf{k}' の重なり積分 I_0 は次のように表される。

$$|I_0(i_c, \mathbf{k} | i_c', \mathbf{k}')|^2 = \left| \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{i_c', \mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) u_{i_c, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3r \right|^2 \quad (2-57)$$

ここで、式(2-14)の周期関数のフーリエ変換を用いることにより、式(2-57)を積分計算から総和計算に置き換えることができる。結果として、式(2-57)は次式のようなになる[17]。

$$|I_0(i_c, \mathbf{k} | i_c', \mathbf{k}')|^2 = \left| \sum_{\mathbf{x}} A^*(\mathbf{G}') A(\mathbf{G}) \right|^2 \quad (2-58)$$

ここで、 A は式(2-24)の固有値計算で得られる固有ベクトルである。また、 N は次式で与えられる。

$$N = \left[\exp\left(\frac{\eta \omega_0}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (2-59)$$

ここで、 k_B はボルツマン定数、 T は格子温度である。また、縦方向(LO-like)と横方向(TO-like)に対する結合係数 $C^{\text{LO-like}}$ と $C^{\text{TO-like}}$ はそれぞれ、

$$C^{\text{LO-like}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi e^2 \eta}{V |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 \omega^{\text{LO}}} \left[\frac{\sin^2 \theta}{(1/\varepsilon_{\perp}^{\infty} - 1/\varepsilon_{\perp}^0) \omega_{\perp\perp}^2} + \frac{\cos^2 \theta}{(1/\varepsilon_z^{\infty} - 1/\varepsilon_z^0) \omega_{z\perp}^2} \right]^2 \quad (2-60)$$

$$C^{\text{TO-like}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi e^2 \eta}{V |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 \omega^{\text{TO}}} \frac{(\omega_{\perp\text{T}}^2 - \omega_{z\text{T}}^2)^2 \sin^2 \theta \cos^2 \theta}{(\varepsilon_{\perp}^0 - \varepsilon_{\perp}^{\infty}) \omega_{\perp\text{T}}^2 \cos^2 \theta + (\varepsilon_z^0 - \varepsilon_z^{\infty}) \omega_{z\text{T}}^2 \sin^2 \theta} \quad (2-61)$$

で与えられる[18]。ここで、 θ は c 軸方向と波数ベクトル($\mathbf{k} - \mathbf{k}'$)が成す角、 ω^{LO} と ω^{TO} はそれぞれ縦方向と横方向のフォノン周波数、 $\omega_{\perp\perp}$ と $\omega_{z\perp}$ はそれぞれ c 軸に垂直方向と平行方向の縦方向のフォノン周波数、 $\omega_{\perp\text{T}}$ と $\omega_{z\text{T}}$ はそれぞれ c 軸に垂直方向と平行方向の横方向のフォノン周波数、 $\varepsilon_{\perp}^{\infty}$ と ε_{\perp}^0 はそれぞれ c 軸に垂直方向の高周波および低周波の比誘電率、 ε_z^{∞} と ε_z^0 はそれぞれ c 軸方向の高周波および低周波の比誘電率である。表 2-4 に計算に用いたこれらのパラメータの値をまとめて示す。また、フォノンエネルギー $\hbar\omega_0$ は縦方向と横方向に対してそれぞれ次式で与えられる。

$$(\eta\omega_0)^2 = \eta^2(\omega_{zL}^2 \sin^2\theta + \omega_{zL}^2 \cos^2\theta) : \text{縦方向} \quad (2-62)$$

$$(\eta\omega_0)^2 = \eta^2(\omega_{zT}^2 \sin^2\theta + \omega_{zT}^2 \cos^2\theta) : \text{横方向} \quad (2-63)$$

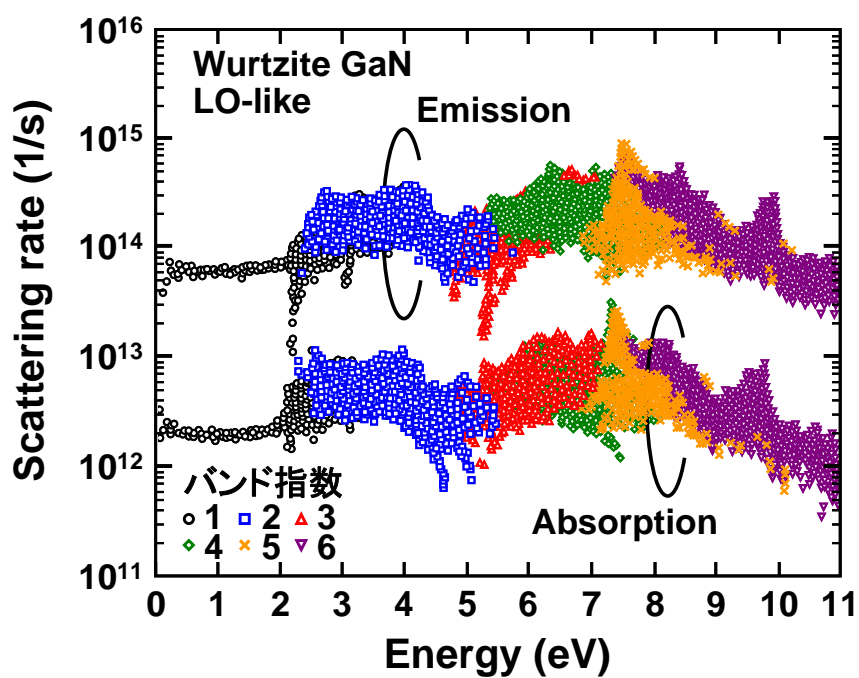
表 2-4 計算に用いた GaN の有極性光学フォノン散乱に対するフォノンエネルギー[17]と誘電率[19]

	66.08 meV	ε_z^0	12.2
$\hbar\omega_{zL}$	91.13 meV	ε_z^∞	5.8
$\hbar\omega_{zT}$	69.55 meV	ε_\perp^0	9.5
$\hbar\omega_{zL}$	92.12 meV	ε_\perp^∞	5.35

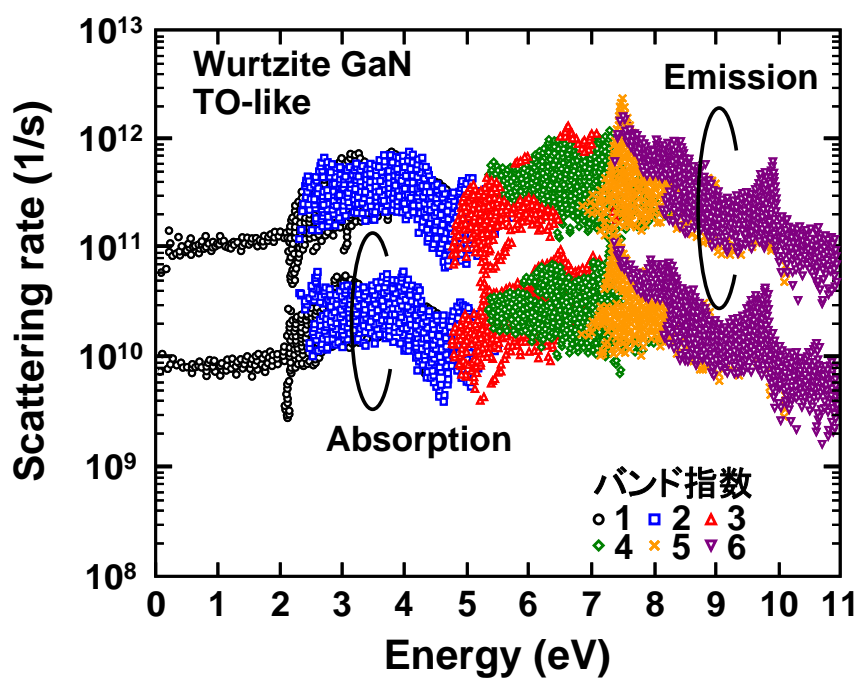
図 2-12 に(a) 縦方向と(b)横方向についての有極性光学フォノン散乱確率のエネルギー依存性を示す。縦方向の有極性光学フォノン散乱は横方向の散乱に比べて、約 3 桁高い遷移確率を有し、吸収過程よりも放出過程が支配的であることが確認できる。また、2 eV 以上の電子エネルギーでは、散乱確率が広がりを示すことが分かる。この散乱確率の広がりには遷移前の波数ベクトル \mathbf{k} に依存して生じる。電子状態(i_c, \mathbf{k})の電子が有極性光学フォノン散乱(放出過程)を起こすには、

$$E(i_c', \mathbf{k}') = E(i_c, \mathbf{k}) - \eta\omega_0 \quad (2-64)$$

を満足する電子状態(i_c', \mathbf{k}')があればよい。したがって、同一エネルギー上の電子状態を比較した場合、各々の電子が有極性光学フォノン散乱過程によって遷移する可能性のある電子状態(i_c', \mathbf{k}')の数は等しいはずである。しかし、電子状態(i_c, \mathbf{k})の違いは式(2-58)で表される重なり積分や式(2-60), (2-61)で与えられる結合係数に含まれる $|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|^2$ あるいは θ を変化させる。このため、計算した散乱確率は波数ベクトル \mathbf{k} に依存する。結果として、計算した散乱確率は各エネルギーで広がりを示した。ただし、2 eV 以下の電子エネルギーでは、遷移確率の広がりは小さい。この理由は、2 eV 以下の電子は、放物線性の高い Γ 谷のみに存在するためである(図 2-4 (a))。ただし、図 2-5(a)と(b)の比較で確認できたように、 Γ 谷にもわずかな面方位依存性があり、これが、2 eV 以下で散乱確率がわずかに広がりを示す理由である。



(a)



(b)

図 2-12 計算したウルツ鉱構造 GaN の(a)縦方向および(b)横方向についての有極性光学フォノン散乱確率のエネルギー依存性

2-2-3 変形ポテンシャル散乱

半導体のエネルギーバンド構造は原子の周期性とそのポテンシャルの大きさに強く依存する。そのため、結晶(格子)が変形するとエネルギーバンド構造も変化する。このようなポテンシャルの局所的な変形は電子に影響を及ぼす。このときの散乱を変形ポテンシャル散乱という。この散乱過程は光学フォノンモードと音響フォノンモードをもつ。光学フォノンモードは無極性光学フォノン散乱と呼ばれ、一方、音響フォノンモードは音響フォノン散乱と呼ばれる。無極性光学フォノン散乱によって波数ベクトル \mathbf{k} の電子が \mathbf{k}' の電子状態に遷移する確率 S_{DP} は

$$\begin{aligned} S_{DP}(i_c, \mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{\pi}{\rho \omega} \Delta_{DP}^2 |I_0(i_c, \mathbf{k} | i_c', \mathbf{k}')|^2 \delta[E(i_c', \mathbf{k}') - E(i_c, \mathbf{k}) \pm \eta \omega] \left(N + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \\ &= \frac{\pi}{\rho \omega} \Delta_{DP}^2 |I_0(i_c, \mathbf{k} | i_c', \mathbf{k}')|^2 D(i_c', \mathbf{k}') \left(N + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (2-65)$$

として与えられる[20]。ここで、 ρ は結晶の密度、 ω は光学フォノン周波数、 Δ_{DP} は光学モードの変形ポテンシャルである。計算では、フォノン周波数と変形ポテンシャルについて、それぞれ、 $\omega = \omega_0$, $\Delta_{DP} = 13.2 \times 10^8$ eV/cm とした[21]。

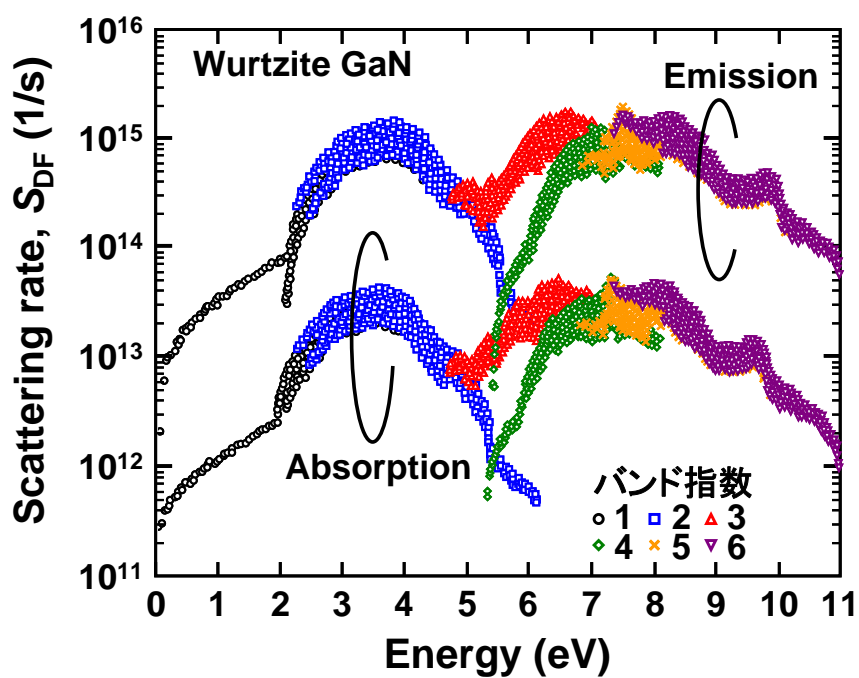
また、音響フォノン散乱については、音響フォノンエネルギーが $k_B T$ より小さく、遷移前後で電子エネルギーの変化がないと仮定する。この場合、音響フォノン散乱機構の放出過程と吸収過程の区別はなくなる。音響フォノン散乱によって波数ベクトル \mathbf{k} の電子が \mathbf{k}' の電子状態に遷移する確率 S_{AC} は次式で与えられる[22]。

$$\begin{aligned} S_{AC}(i_c, \mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{2\pi}{\eta} \frac{\eta |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|}{\rho s V} \Delta_{AC}^2 |I_0(i_c, \mathbf{k} | i_c', \mathbf{k}')|^2 \delta[E(i_c', \mathbf{k}') - E(i_c, \mathbf{k})] N_a \\ &= \frac{2\pi}{\eta} \frac{\eta |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|}{\rho s V} \Delta_{AC}^2 |I_0(i_c, \mathbf{k} | i_c', \mathbf{k}')|^2 D(i_c', \mathbf{k}') N_a \end{aligned} \quad (2-66)$$

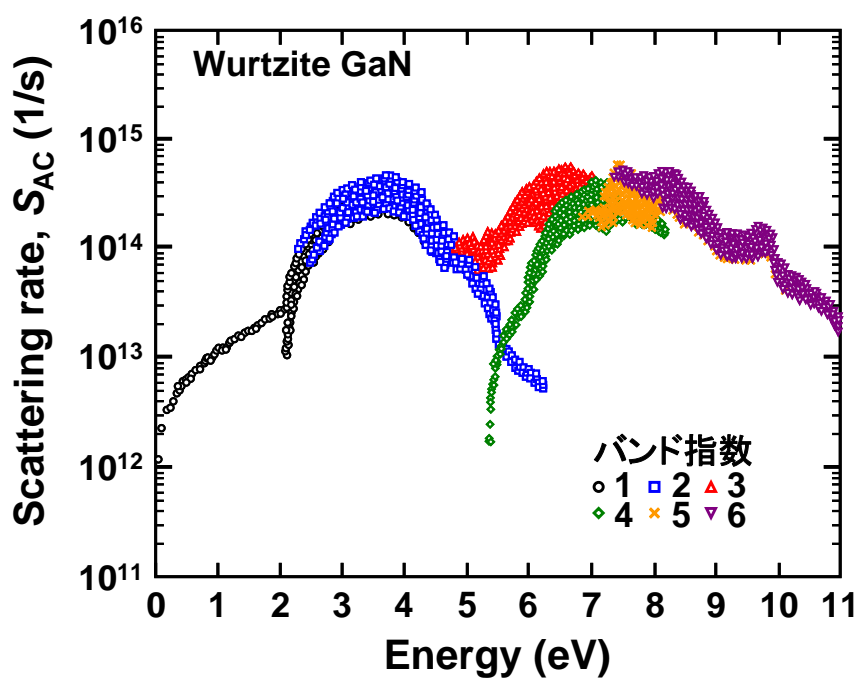
ここで、 Δ_{AP} は音響モードの変形ポテンシャル、 s は固体中の音速、 V は固体の体積、 N_a は音響フォノンの占有数である。音響モードの変形ポテンシャルについて、 $\Delta_{AP} = 10.1$ eV とした[23]。また、音響フォノンの占有数 N_a は

$$N_a = \left[\exp \left(\frac{\eta s |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|}{k_B T} \right) - 1 \right]^{-1} \quad (2-67)$$

で与えられる。図 2-13 に(a) 無極性光学フォノン散乱確率および(b)音響フォノン散乱のエネルギー依存性を示す。変形ポテンシャル散乱では、無極性光学フォノン散乱が、音響フォノン散乱に比べて高い散乱確率を示すことが分かる。また、無極性光学フォノン散乱においても、有極性光学フォノン散乱の場合と同様に、放出過程が吸収過程より 1 桁以上高い散乱確率を示した。ここで、図 2-12 (a)に示した有極性光学フォノン散乱の放出過程(S_{POP})と図 2-13 (a)に示した無極性光学フォノン散乱の放出過程(S_{DF})を比較すると、2 eV 以下の電子エネルギーのとき、 $S_{\text{DF}} < S_{\text{POP}}$ となり、一方、2 eV 以上の場合、 $S_{\text{DF}} > S_{\text{POP}}$ となる。すなわち、高エネルギー領域の電子-フォノン相互作用は無極性光学フォノン散乱が支配的な散乱機構であることが分かった。また、変形ポテンシャル散乱でも、2 eV 以上の電子エネルギーで、散乱確率が広がりを示した。遷移確率が広がりを示す理由は有極性光学フォノン散乱の場合と同様である。



(a)



(b)

図 2-13 計算したウルツ鉱構造 GaN の(a) 無極性光学フォノン散乱確率および(b)音響フォノン散乱確率のエネルギー依存性

2-2-4 圧電ポテンシャル散乱

ダイヤモンド構造や閃亜鉛鉱構造の半導体では、結晶がひずみを受けると分極を生ずること(圧電性)がある。この圧電性によるポテンシャルは結晶の格子振動に付随して起こり、電子はこのポテンシャルによって散乱される。一方、ウルツ鉱構造半導体は結晶ひずみを伴わなくとも、分極を有している(自発分極)。特に、窒化物半導体は非常に強い自発分極を示すため、圧電ポテンシャル散乱を考慮することは重要である。ウルツ鉱構造半導体についての圧電ポテンシャル散乱の散乱確率は

$$\begin{aligned} S_{\text{PZ}}(i_c, \mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{2\pi}{\eta} K_{\text{av}}^2 \frac{e^2 k_B T}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 \varepsilon^*} \left| I_0(i_c, \mathbf{k} | i_c', \mathbf{k}') \right|^2 \delta[E(i_c', \mathbf{k}') - E(i_c, \mathbf{k})] \\ &= \frac{2\pi}{\eta} K_{\text{av}}^2 \frac{e^2 k_B T}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 \varepsilon^*} \left| I_0(i_c, \mathbf{k} | i_c', \mathbf{k}') \right|^2 D(i_c', \mathbf{k}') \end{aligned} \quad (2-68)$$

として表される[24]。ここで、 K_{av}^2 は電子機械結合係数、 ε^* は有効比誘電率である。また、 K_{av}^2 は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} K_{\text{av}}^2 &= \frac{\langle e_1^2 \rangle}{\varepsilon^* c_L} + \frac{\langle e_t^2 \rangle}{\varepsilon^* c_T} \\ \langle e_1^2 \rangle &= \frac{1}{7} e_{33}^2 + \frac{4}{35} e_{33} (e_{31} + 2e_{15}) + \frac{8}{105} (e_{31} + 2e_{15})^2 \\ \langle e_t^2 \rangle &= \frac{2}{35} (e_{33} - e_{31} - e_{15})^2 + \frac{16}{105} e_{15} (e_{33} - e_{31} - e_{15}) + \frac{16}{35} e_{15}^2 \end{aligned} \quad (2-69)$$

ここで、 c_L , c_T は弾性定数であり、 e_{15} , e_{31} , e_{33} は圧電定数である。表 2-5 にウルツ鉱構造 GaN に対する弾性定数および圧電定数をまとめる。

表 2-5 GaN の弾性定数および圧電定数[25]

e_{15}	e_{31}	e_{33}	C_L (Pa)	C_T (Pa)
-0.3	-0.33	0.65	2.65×10^{11}	4.42×10^{10}

図 2-14 に計算したウルツ鉱構造 GaN の圧電ポテンシャル散乱確率のエネルギー依存性を示す。圧電ポテンシャル散乱は、光学フォノン散乱に比べ、全エネルギーに亘って散乱確率が低い。そのため、圧電ポテンシャル散乱は支配的な散乱機構ではない。しかしながら、圧電ポテンシャル散乱は音響フォノン散乱と同等の散乱確率を示すことから、電子のドリフト速度や移動度に影響を及ぼすはずである。また、理想的な結晶を仮定した場合でも、ウルツ鉱構造結晶では自発分極が維持されるので、圧電ポテンシャル散乱を無視することは適切ではないと考えられる。

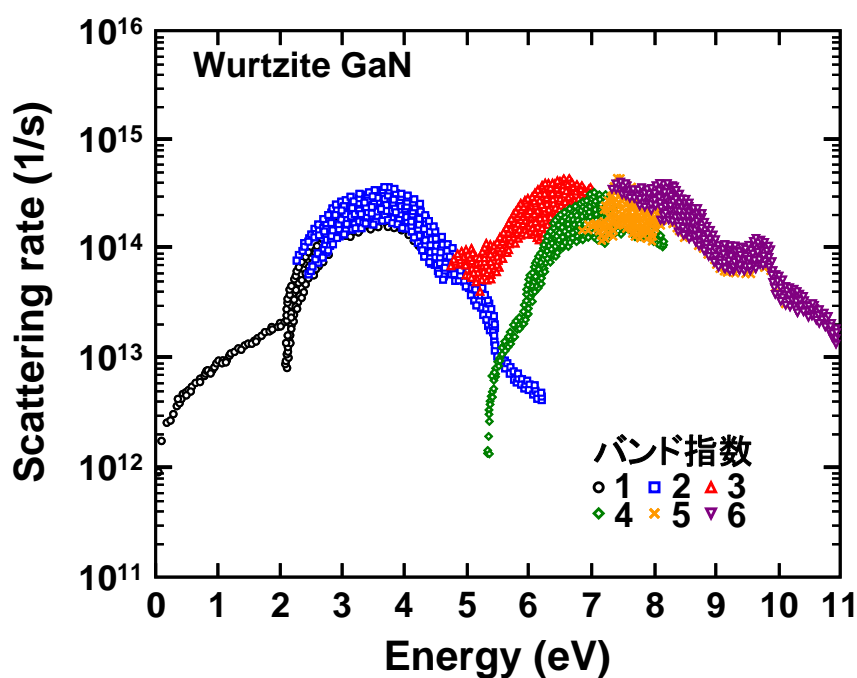


図 2-14 計算したウルツ鉱構造 GaN の圧電ポテンシャル散乱確率のエネルギー依存性

2-2-5 イオン化不純物散乱

結晶内にドナーやアクセプタの不純物原子が存在し、これらがイオン化している場合、そのクーロン力によって電子は散乱される。これがイオン化不純物散乱である。イオン化不純物散乱は低温かつ低電界下で、支配的となる散乱機構である。イオン化不純物散乱に対する散乱確率は Brooks-Herring 近似によって計算される[26]。電荷 ze における実空間上のクーロンポテンシャルを V_i とすると、

$$V_i(\mathbf{r}) = \frac{ze^2}{4\pi\epsilon r} \quad (2-70)$$

と表される。ここで、 ϵ は誘電率、 \mathbf{r} は不純物の位置である。いま、遮蔽されたクーロンポテンシャルを仮定すると、デバイの遮蔽距離 λ_D は次式で与えられる。

$$\lambda_D = \frac{1}{q_s} = \sqrt{\frac{\epsilon k_B T}{n e^2}} \quad (2-71)$$

ここで、 n は電子密度、 q_s は遮蔽距離の逆数である。個々のイオン化不純物に対するクーロンポテンシャルをフーリエ変換すると[24]、

$$\begin{aligned} V_i(\mathbf{q}) &= \frac{1}{\Omega} \int \frac{ze^2}{4\pi\epsilon r} e^{-iq_s r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3r \\ &= \frac{ze^2}{4\pi\epsilon \Omega} \int \frac{1}{r} e^{-iq_s r - i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3r \\ &= \frac{ze^2}{4\pi\epsilon \Omega} 2\pi \int_0^\infty r dr \int_1^{-1} e^{-iq_s r - i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} \cos\theta} (-d\cos\theta) \\ &= \frac{ze^2}{\epsilon \Omega} \frac{1}{q^2 + q_s^2} \end{aligned} \quad (2-72)$$

が得られる。ここで、 $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ である。結晶の単位体積あたりに N_i 個のイオン化不純物が存在するとき、そのポテンシャルのフーリエ係数は

$$V_i(\mathbf{q}) = \sum_{i=1}^{N_i} \frac{ze^2}{\epsilon \Omega} \frac{1}{q^2 + q_s^2} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} \quad (2-73)$$

となる。したがって、イオン化不純物散乱に対する散乱確率は次式で与えられる。

$$S_i(i_c', k, k') = \frac{2}{\eta} n_I \left(\frac{ze^2}{\varepsilon} \right)^2 \frac{1}{(q^2 + q_S^2)^2} |I_0(i_c, k | i_c', k')|^2 D(i_c', k') \quad (2-74)$$

ここで、 n_I は不純物濃度($n_I = N_I/\Omega$)である。図 2-15 に計算したウルツ鉱構造 GaN のイオン化不純物散乱確率のエネルギー依存性を示す。ここで、不純物濃度は $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ とし、不純物原子が全てイオン化したものとして散乱確率を求めた。イオン化不純物散乱は電子のエネルギーにほとんど依存しないことが分かる。また、室温では、イオン化不純物散乱は光学フォノン散乱に比べて、3 桁以上小さい散乱確率を示す。

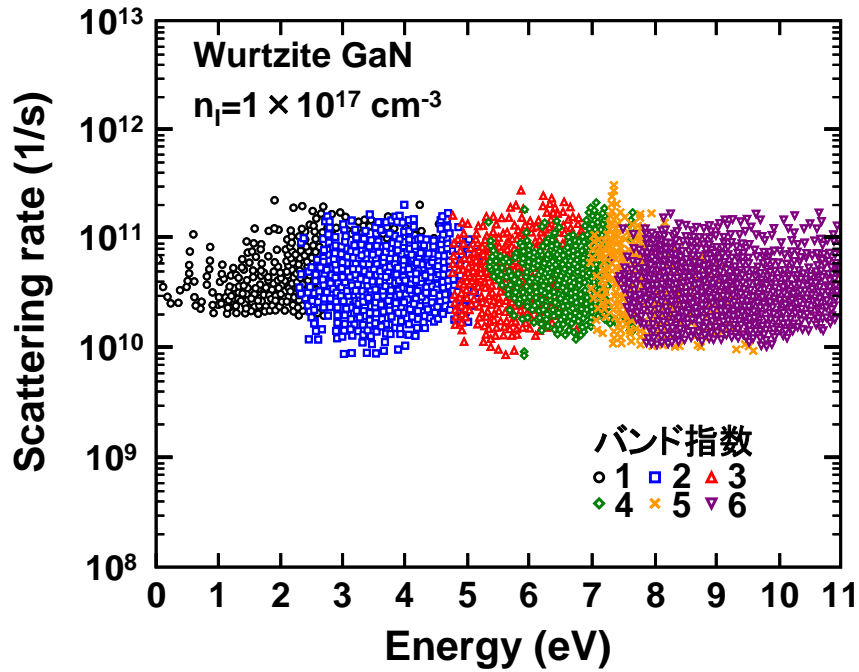


図 2-15 計算したウルツ鉱構造 GaN のイオン化不純物散乱確率のエネルギー依存性

2-2-6 転位散乱

現在の GaN 系デバイスに用いられる主な基板材料はサファイア, SiC あるいは Si である。これら異種の材料を基板として用いた場合、結晶には格子不整合が生じる。サファイア, SiC あるいは Si 基板それぞれと GaN の間で生じる不整合率は 14[27], 3.4[28], 17%[29]であるとの報告がなされている。この不整合は結晶中に高密度の転位欠陥を引き起こす。そして、この転位は電子に対してアクセプタ型の不純物に似た作用をもたらすということが報告されている[30]。このとき、転位散乱の散乱確率は次式で与えられる[31]。

$$S_{\text{dis}}(i_c', \mathbf{k}, \mathbf{k}'_{\perp}) = \frac{2\pi}{\eta} \frac{n_{\text{dis}} e^4 \lambda_D^4 f^2}{\varepsilon^2 c^2 (1 + q^2 \lambda_D^2)^2} |I_0(i_c, \mathbf{k} | i_c', \mathbf{k}'_{\perp})|^2 D_2(i_c', \mathbf{k}'_{\perp}) \quad (2-75)$$

ここで、 \mathbf{k}'_{\perp} は a 面上の波数ベクトル成分 ($\mathbf{k}'_{\perp} = \mathbf{k}'_x + \mathbf{k}'_y$)、 n_{dis} は転位密度、 f は占有トラップ比、 c は c 軸に垂直方向の格子定数、 D_2 は c 軸に垂直方向の 2 次元状態密度である。転位散乱において、遷移前後で、結晶表面に垂直方向の波数ベクトルは保存される。図 2-16 に計算したウルツ鉱構造 GaN のイオン化不純物散乱確率のエネルギー依存性を示す。ここで、転位密度は $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ とした。式(2-75)の転位散乱確率はアクセプタ型の不純物に似た作用として定義されているので、転位散乱もまた、イオン化不純物散乱と同様に、電子のエネルギーにほとんど依存しない。

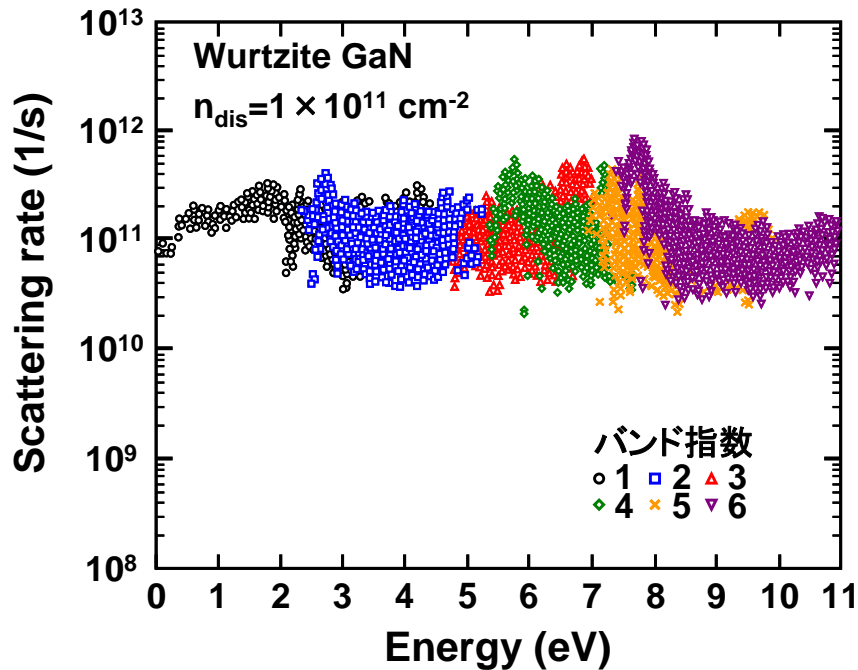


図 2-16 計算したウルツ鉱構造 GaN の転位散乱確率のエネルギー依存性

2-2-7 衝突イオン化

高電界下における電子の運動を考える上で、衝突イオン化過程は重要な現象のひとつである。衝突イオン化は高電界領域に存在する電子がバンドギャップ以上の十分に高いエネルギーをもった場合に起こりうる散乱過程である。そして、衝突イオン化過程が生じた場合、新たな電子-正孔対が生成される。衝突イオン化過程が繰り返し生じたとき、過剰なキャリアの発生、すなわち、アバランシェブレイクダウンを引き起こす。したがって、デバイスの耐圧計算を行う上で、耐圧を決定する重要な物理現象のひとつである。衝突イオン化過程は電子-フォノン相互作用とは違い、価電子帯中の電子の考慮を加える必要がある。そこで、衝突イオン化の遷移過程を図 2-17 の模式図を用いて説明する。

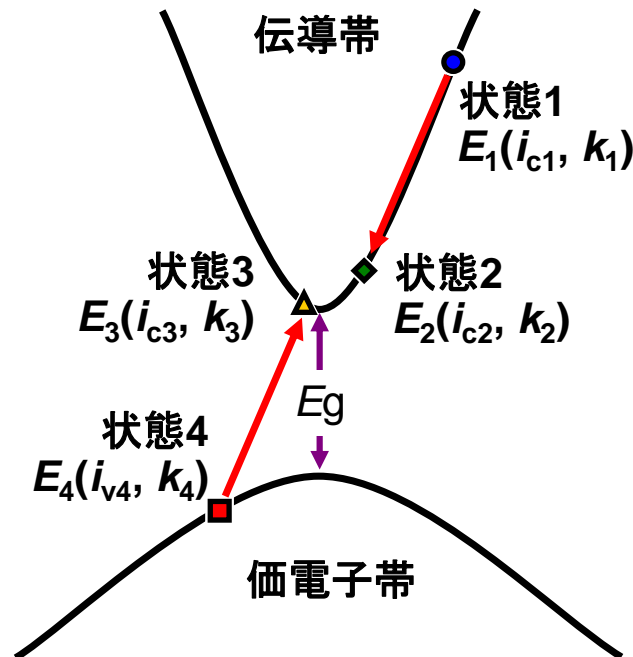


図 2-17 衝突イオン化過程の模式図

図 2-17 において、状態 1 は衝突イオン化過程を起こす前の伝導帯中の電子状態、状態 2 は衝突イオン化過程によって状態 1 の電子が遷移する伝導帯中の電子状態、状態 3 は衝突イオン化過程によって状態 4 の電子が遷移する伝導帯中の電子状態、状態 4 は衝突イオン化過程を起こす前の価電子帯中の電子状態である。遷移前の状態では、状態 1 の電子はバンドギャップ(E_g)より高いエネルギーでなければならない。これは、状態 4 の電子にエネルギーを与え、その電子を価電子帯から伝導帯へ励起させるためである。衝突イオン化が起こると、状態 1 の電子はエネルギーを失うため、失ったエネルギーに相当する電子状態 2 へ

移る。一方、状態 4 の電子は状態 1 から得たエネルギーに相当する電子状態 3 へ遷移する。このとき、状態 3 に遷移した電子は新たなキャリア電子となり、さらに、状態 4 には正孔ができる。このように、新たな電子-正孔対が発生する。ここで、衝突イオン化過程では遷移前後で、電子エネルギーと運動量が同時に保存されなければならない。すなわち、次の 3 つの式を満たす電子の組み合わせに対してのみ、衝突イオン化過程が起こる可能性がある。

$$\begin{aligned} E(i_{c1}, \mathbf{k}_1) - E(i_{c2}, \mathbf{k}_2) &\geq E_g \\ |E(i_{c1}, \mathbf{k}_1) - E(i_{c2}, \mathbf{k}_2)| &= |E(i_{c3}, \mathbf{k}_3) - E(i_{v4}, \mathbf{k}_4)| \\ \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 &= \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3 \end{aligned} \quad (2-76)$$

また、衝突イオン化の遷移確率は次式によって与えられる[32, 33]。

$$\begin{aligned} S_{ii}(i_{c1}, \mathbf{k}_1) &= \frac{2\pi}{\eta} \frac{V}{(2\pi)^6} \sum_{i_{c2}, i_{c3}, i_{v4}} \int d^3k_2 \int d^3k_4 |M|^2 \delta[E_1(i_{c1}, \mathbf{k}_1) - E_2(i_{c2}, \mathbf{k}_2) - E_3(i_{c3}, \mathbf{k}_3) + E_4(i_{v4}, \mathbf{k}_4)] \quad (2-77) \\ &= \frac{4}{\eta\pi} \left(\frac{e^2}{a}\right)^2 \frac{(\Delta\mathbf{k})^6}{\delta E} \sum_{i_{c2}, i_{c3}, i_{v4}} \sum_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_4} |M|^2 \delta[E_1(i_{c1}, \mathbf{k}_1) - E_2(i_{c2}, \mathbf{k}_2) - E_3(i_{c3}, \mathbf{k}_3) + E_4(i_{v4}, \mathbf{k}_4)] \end{aligned}$$

ここで、 k は波数ベクトル、 E は電子のエネルギー、 i_c はバンド指数、 \hbar はプランク定数/ 2π 、 V は単位体積、 M は確率振幅(行列要素)である。添え字は図 2-17 で示した各電子状態に合わせて示している。式(2-77)で与えられる遷移確率は、状態 1 の電子について遷移可能な電子状態の全ての組み合わせに対する遷移確率の和に相当する。また、確率振幅 M は直接過程 M_D と交換過程 M_E に分けられ、次式で表される[32]。

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{2} \left| M_D^2 + M_E^2 + (M_D - M_E)^2 \right| \\ M_D &= \frac{4\pi e^2}{V} \sum_{\mathbf{G}} \frac{I_0(i_{c1}, \mathbf{k}_1 | i_{c2}, \mathbf{k}_2; \mathbf{G}) + I_0(i_{v4}, \mathbf{k}_4 | i_{c3}, \mathbf{k}_3; \mathbf{G})}{\varepsilon(\mathbf{q})(\mathbf{q} + \lambda_D)^2} \\ M_E &= \frac{4\pi e^2}{V} \sum_{\mathbf{G}} \frac{I_0(i_{c1}, \mathbf{k}_1 | i_{c3}, \mathbf{k}_3; \mathbf{G}) + I_0(i_{v4}, \mathbf{k}_4 | i_{c2}, \mathbf{k}_2; \mathbf{G})}{\varepsilon(\mathbf{q})(\mathbf{q} + \lambda_D)^2} \end{aligned} \quad (2-78)$$

ここで、 I_0 は重なり積分、 ε は誘電率、 e は素電荷、 λ_D はデバイの遮蔽距離長、 n_0 は電子キャリア密度、 \mathbf{G} は逆格子ベクトル、 \mathbf{q} は運動量遷移($\mathbf{q} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{G}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{G}_2$)である。また、衝突イオン化の遷移確率の計算では、ウムクラップ過程を含めた運動量保存則、

$$\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3 + \mathbf{G}_2 \quad (2-79)$$

を考慮した。

図 2-18 に計算したウルツ鉱構造 GaN の衝突イオン化の遷移確率の電子エネルギー依存性を示す。各点のシンボルは伝導帯の状態 1 の電子のバンド指数を表す。遷移の起こり始める(しきい値) エネルギーは 3.8 eV であり、バンドギャップ(3.4 eV)より大きいことが分かる。この差はエネルギー保存と運動量保存則を同時に満たす必要があるという制限のためである。3.4~3.8 eV のエネルギーをもつ電子が衝突イオン化を起こすためには、価電子帯中の電子(-3.8~-3.4 eV)にエネルギーを与えて伝導帯に励起させるが必要があり、遷移後にこれらの電子が取るべき終状態は伝導帯中の 0~0.4 eV の電子エネルギーに相当する状態でなければならない。これらの電子エネルギーに相当する電子状態を 2-1-3 節で示したエネルギーバンド構造(図 2-4 (a))と比較すると、対応する状態 2 (0~0.4 eV), 状態 3 (0~0.4 eV), 状態 4(-3.8~-3.4 eV)は Γ 点近傍にのみ位置し、状態 1(3.4~3.8 eV)は Γ 点付近に存在しないことが分かる。このことから、状態 1(3.4~3.8 eV)の電子については、エネルギーと運動量保存則を同時に満たすような電子状態が価電子帯に存在しない。そのために、3.4~3.8 eV の電子は衝突イオン化が許されず、結果として遷移確率がゼロとなる。また、計算した遷移確率は 3.8 eV 以上の電子エネルギーで 2-4 桁の範囲の広がりを出す。この非常に大きな広がりには次の 2 つの理由によって生じる。1 つ目の理由は遷移過程の可能な数が始状態 1 によって異なることである。

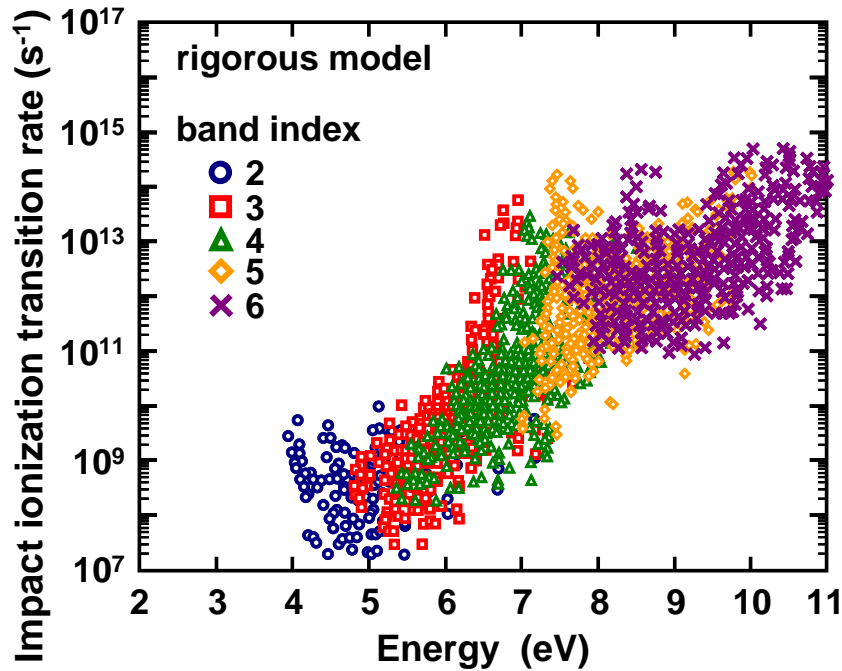
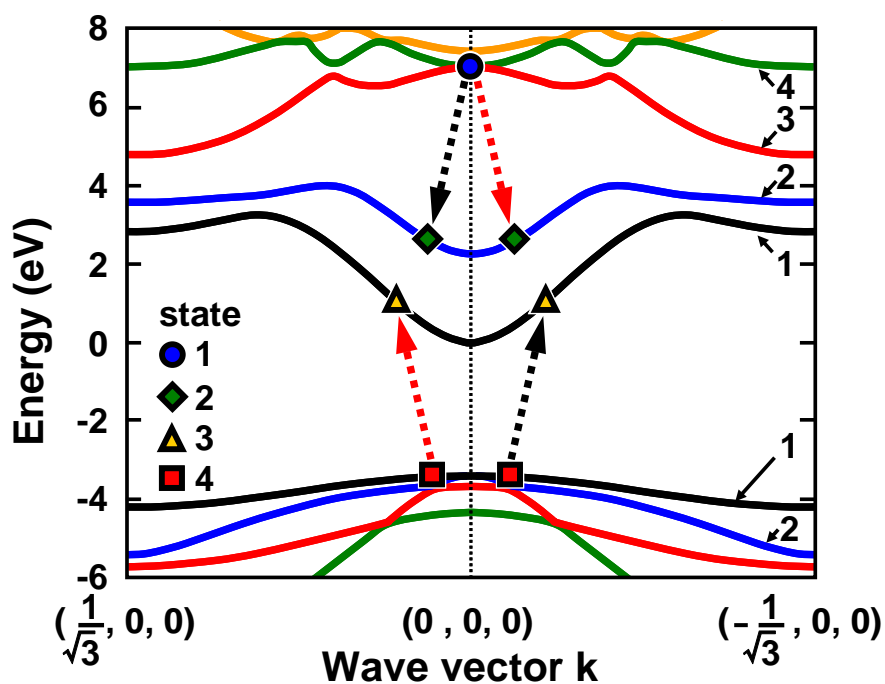
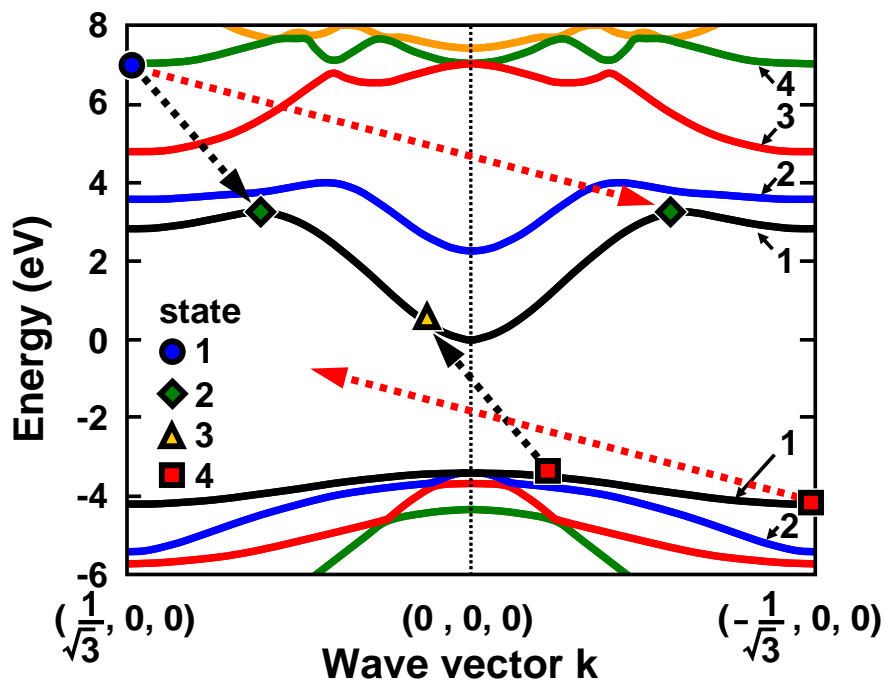


図 2-18 衝突イオン化の遷移確率の電子エネルギー依存性

遷移過程の可能な数が始状態 1 によって異なることを説明するために、同一エネルギー上の異なる 2 つ始状態を例に挙げ、衝突イオン化の遷移過程を比較する。図 2-19 に (a) Γ 点上の始状態と (b) M 点上の始状態それぞれの電子についての遷移過程を示す。ここで、横軸は波数ベクトル M 点 $(-1/\sqrt{3}, 0, 0)$, Γ 点 $(0, 0, 0)$, M 点 $(1/\sqrt{3}, 0, 0)$ に沿った波数ベクトルとして示した。丸印は始状態 1, 菱形印は終状態 2, 三角印は終状態 3, 四角印は始状態 4 である。図 2-19 (a)と(b)において、実線で示した矢印は遷移過程の一例を示している。そして、破線矢印は実線矢印の場合における終状態 2 と対称となる電子状態に遷移する場合を示している。まず、 Γ 点上の始状態については、図 2-19 (a)のように、実線と破線、どちらの遷移過程もエネルギーおよび運動量保存則を満たすので、衝突イオン化を起こすことが可能である。一方、図 2-19 (b)では、M 点上の電子は実線の遷移についてはエネルギーおよび運動量保存則を満たすが、破線については、価電子帯の電子が伝導帯に遷移する終状態が存在しないため、衝突イオン化は起こらない。このように始状態 1 の電子状態によって、衝突イオン化が可能な遷移過程の数が異なるため、各電子エネルギーで衝突イオン化の遷移確率に広がりが生じる。衝突イオン化の遷移確率の広がりをもたらす理由の 2 つ目が、式 (2-79)で示した運動量遷移(q)である。式(2-78)から分かるように、 q が小さいと遷移確率は高くなる。そして、図 2-19 (a), (b)を比べると、 Γ 点上の電子は運動量遷移の小さい衝突イオン化過程をもつことが分かる。以上の理由から、 Γ 点付近の電子は衝突イオン化の遷移確率が高くなる。実際に、計算した遷移確率のエネルギー依存性(図 2-18)において、バンド指数 2~5 までのおおのこのバンド指数に対する遷移確率の最大値は Γ 点上の電子で生じている。以上の理由から、衝突イオン化過程を起こす状態 1 の電子に従って遷移確率は異なる値を示し、したがって、同一の電子エネルギーで、遷移確率は広がりを出すことになる。



(a)



(b)

図 2-19 (a) Γ 点上の始状態と(b) M 点上の始状態それぞれの電子についての衝突イオン化の遷移過程

式(2-77)を用いて計算した衝突イオン化の遷移確率は、フルバンド構造を考慮して決定した(以下、この計算を行ったモデルを“厳密モデル”と呼ぶ)。しかし、デバイス計算(あるいはキャリア輸送計算の一部)に対して厳密モデルを直接適用すると、計算に要する時間が大きく増加し、現実的ではない。そのため、一般には次式のような衝突イオン化の遷移確率をエネルギーのみの関数に置き換えた簡略化したモデル(以下、“従来モデル”と呼ぶ)が用いられてきた。

従来モデルでは、エネルギーに依存した衝突イオン化の遷移確率、すなわち、次式で定義されるような、微小エネルギーごとに厳密モデルで決定した遷移確率に対して単純な平均を行った遷移確率を使用される[34]。

$$S_{iic}(E) = \frac{\sum_{i_{c1}} \int d^3 k_1 \delta[E - E(i_{c1}, k_1)] w_{ii}(E(i_{c1}, k_1))}{\sum_{i_{c1}} \int d^3 k_1 \delta[E - E(i_{c1}, k_1)]} \quad (2-80)$$

式(2-80)の計算において、デルタ関数 δE は Kolnik らによって報告された方法を用いて計算し[35]、微小エネルギー区間 δE は 0.01eV とした。分母は E と $E+\delta E$ 間のエネルギーに属する \mathbf{k} の状態の総数を計算することに相当する。一方、分子は E と $E+\delta E$ 間のエネルギーに属する \mathbf{k} の状態のイオン化確率の総数に相当する。すなわち、式(2-80)はエネルギー間隔 δE に属するすべての電子の衝突イオン化の遷移確率を平均した遷移確率を求めることになる。式(2-80)の右辺には、バンド指数が含まれている。しかし、総和を取ることによって、遷移確率のバンド指数依存性は無視されることになり、結果として、従来モデルの遷移確率(式(2-80)の左辺)には、バンド指数が考慮されていない。図 2-19 の厳密モデルの計算結果で示したように、遷移確率は波数ベクトルだけでなくバンド指数にも強く依存する。そのため、バンド指数を無視した従来モデルでは、衝突イオン化の遷移確率の計算において、精度が劣ることになる。

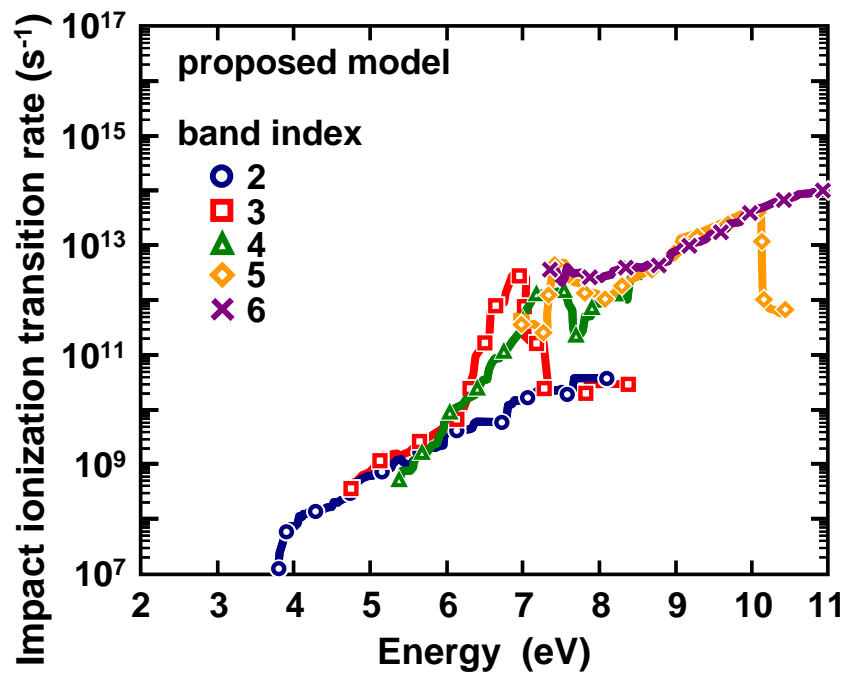
本研究では、従来モデルの問題点を改良する方法として、バンド指数を考慮し、より厳密的な計算結果が得られ、かつ、現実的な計算時間の範囲内で計算結果を得ることができる新しいモデル(以下、“提案モデル”と呼ぶ)を提案する。

提案モデルの遷移確率は次式で与えられる。次式で重要な点は、バンド指数の考慮が維持されていることである。

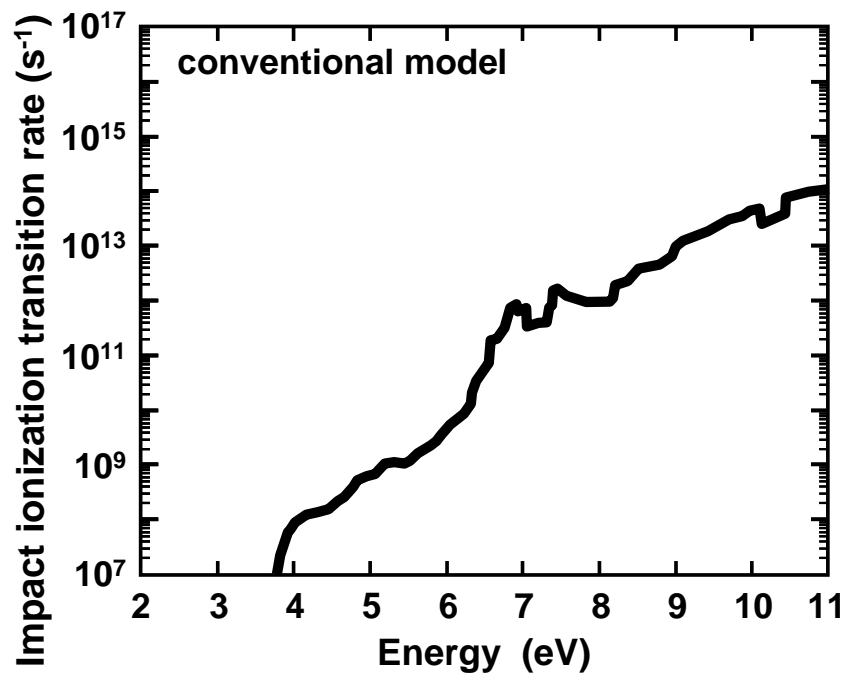
$$S_{iip}(i_{c1}, E) = \frac{\int d^3 k_1 \delta[E - E(i_{c1}, k_1)] w_{ii}(E(i_{c1}, k_1))}{\int d^3 k_1 \delta[E - E(i_{c1}, k_1)]} \quad (2-81)$$

ここで、デルタ関数を計算するための微小エネルギー区間 δE は、(2-80)式と同様に、0.01 eV とした。(2-80)と(2-81)式の違いは総和の有無である。(2-81)式ではバンド指数を維持するために、バンド指数に対する総和の処理を無視した。つまり、(2-81)式はそれぞれのバンド指数に対して、エネルギー平均の処理を行うことにより、遷移確率を決定する。今回の計算では伝導帯のバンド指数を 6 つまで考慮したので、衝突イオン化の遷移確率が 6 つのバンド指数各々で得られる。このため、デバイス解析などへ提案モデルを適用する場合、バンド指数ごとの遷移確率を取り入れることになるが、衝突イオン化過程の処理は従来モデルの方法に、バンド指数の判定を行う処理を加えるのみでよい。そのため、提案モデルを用いた場合でも、解析に要する時間は従来モデルを用いた場合と大差ないと考えられる。

図 2-20 に(a)提案モデルと(b)従来モデルで計算した衝突イオン化の遷移確率のエネルギー依存性をそれぞれ示す。図 2-20 (a)において、丸、四角、三角、菱形、バツ印は、それぞれバンド指数 2, 3, 4, 5, 6 に対応している。各エネルギーにおける遷移確率の最大値は両モデルともエネルギーの増加に伴って増加することが分かる。しかし、提案モデルでは、遷移確率が 6~9eV のエネルギー範囲でバンド指数によって広がりをもつことが分かる。提案モデルと従来モデルの結果の違いを示すために、6~8 eV とそれ以外の電子エネルギーに分けて比較する。まず、6 eV 以下と 9 eV 以上の電子エネルギー領域では、両モデルの遷移確率はほとんど同じエネルギー依存性を示す。すなわち、このエネルギー領域では、バンド指数を考慮してもしなくても、遷移確率は同じである。これは、厳密モデルの結果において、6 eV 以下では、バンド指数 2 と 3 の遷移確率が各々の電子エネルギーで同等の遷移確率の広がりを示し、また、9 eV 以上では、バンド指数 5 と 6 の遷移確率が同じ広がりを示すためである。一方、6~8 eV のエネルギー領域では、厳密モデルで求まる遷移確率がバンド指数に強く依存することを反映して、提案モデルの遷移確率はバンド指数ごとに異なるエネルギー依存性を示す。例えば、6.5 eV では、バンド指数 2, 3, 4 の遷移確率がそれぞれ $5.8 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$, 1.9×10^{11} , $3.6 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ であり、遷移確率がバンド指数に違いによって 2 桁の広がりをもつ。一方、従来モデルの計算では、6.5 eV での遷移確率が $5.9 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ である。つまり、6.5 eV の電子エネルギーでは、従来モデルの遷移確率は提案モデルの遷移確率に比べて、バンド指数 3 については過小評価となり、バンド指数 2 と 4 については過大評価となる。以上のように、遷移確率の結果においては、バンド指数を考慮する必要があるが、従来モデルでは過大/過小評価される可能性があることが分かった。



(a)



(b)

図 2-20 (a) 提案モデルおよび(b)従来モデルで計算したウルツ鉍構造 GaN における衝突イオン化の遷移確率の電子エネルギー依存性

2-3 まとめ

この章では、経験的擬ポテンシャル法に基づき、ウルツ鉱構造結晶に対するエネルギーバンド構造の計算手法を述べた。また、擬ポテンシャル法を用いて計算した GaN, InN, AlN のエネルギーバンド構造の計算結果を示した。InN と AlN の擬ポテンシャルパラメータについて、有効質量とバンドギャップを再現することができるパラメータを本研究で導出した。また、混晶半導体のバンド構造を決定する場合、その擬ポテンシャルパラメータは、仮想結晶近似を考慮して、2 元素半導体各々の擬ポテンシャルパラメータを線形補間した値を用いることにより、問題なく計算できることが分かった。さらに、数値計算したバンド構造を用いて決まる状態密度および各散乱機構の計算結果についても述べた。各散乱確率の結果を比較すると、低い電子エネルギーでは、有極性光学フォノン散乱の LO モードの放出過程が支配的であり、一方、高エネルギーでは、無極性光学フォノン散乱が支配的であることが分かった。また、自発分極を有するウルツ鉱構造 GaN において、圧電ポテンシャル散乱は音響フォノン散乱と同程度の散乱確率を有することが分かった。フルバンド構造を用いて計算する衝突イオン化の遷移確率の厳密モデルの計算を示し、遷移確率のエネルギー依存性について、詳細に議論した。また、厳密モデルを単純にエネルギー平均するという近似によって得られる従来モデルの問題点を改良する方法として、バンド指数を考慮し、より高精度な計算結果が得られ、かつ、現実的な計算時間の範囲内で計算結果を得ることができる新しいモデルを提案した。提案したモデルの結果を示すことで、従来モデルでは遷移確率が過大/過小評価される可能性があることを示した。提案したモデルの実用性は第 3 章および第 4 の計算結果で議論する。

参考文献

- [1] G. B. Bachelet, D. R. Hamann, and M. Schlüter, “Pseudopotentials that work: from H to Pu”, Phys. Rev. B, 26, 4199, 1982.
- [2] M. Cardona and F. H. Pollak, “Energy-band structure of germanium and silicon: the k·p method”, Phys. Rev., 142, 530, 1966.
- [3] J. Callaway, “Orthogonalized plane wave method”, Phys. Rev., 97, 92, 1955.
- [4] M. Miasek, “Tight-binding method for hexagonal close-packed structure”, Phys. Rev., 107, 92, 1957.
- [5] Y. Kamakura, H. Mizuno, M. Yamaji, M. Morifuji, K. Taniguchi, and C. Hamaguchi, “Impact ionization model for full band Monte Carlo simulation”, J. Appl. Phys., 75, 3500, 1994.
- [6] İ. H. Oğuzman, J. Kolnik, K. F. Brennan, R. Wang, T. N. Fang, and P. P. Ruden, “Hole transport properties of bulk zinc-blende and wurtzite phases of GaN based on an ensemble Monte Carlo calculation including a full zone band structure”, J. Appl. Phys., 80, 4429, 1996.
- [7] L. Tirino, M. Weber, and K. F. Brennan, “Temperature dependence of the impact ionization coefficients in GaAs, cubic SiC, and zinc-blende GaN”, J. Appl. Phys., 94, 423, 2003.
- [8] J. C. Phillips and L. Kleinman, “New method for calculating wave functions in crystals and molecules”, Phys. Rev., 116, 287, 1959.
- [9] 浜口 智尋, “半導体物理”, (朝倉書店, 2001).
- [10] H. Morkoc, “Handbook of nitride semiconductors and devices, volume 1, materials properties, physics growth”, (Wiley-VCH, Berlin, 2008).
- [11] M. Goano, E. Bellotti, E. Ghillino, C. Garetto, G. Ghione, and K. F. Brennan, “Band structure nonlocal pseudopotential calculation of the III-nitride wurtzite phase materials system. Part II. Ternary alloys $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, and $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ ”, J. Appl. Phys. 88, 6476, 2000.
- [12] Y. Ando, W. Contrata, N. Samoto, H. Miyamoto, K. Matsunaga, M. Kuzuhara, K. Kunihiro, K. Kasahara, T. Nakayama, Y. Takahashi, N. Hayama, and Y. Ohno, “Gate Length Scaling for $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{GaN}$ HJFETs: Two-Dimensional Full Band Monte Carlo Simulation Including Polarization Effect,” IEEE Trans. on Electron Devices, 47, 1965, 2000.
- [13] 服部 力, 名取 亮, 小国 力, “Fortran77 による数値計算ソフトウェア”, (丸善, 1990).
- [14] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, “Nonlocal pseudopotential calculations for the electronic

- structure of eleven diamond and zinc-blende semiconductors”, *Phys. Rev. B*, 14, 556, 1976.
- [15] D. C. Look and R. J. Molnar, “Degenerate layer at GaN/sapphire interface: Influence on Hall-effect measurements”, *Appl. Phys. Lett.*, 70, 3377, 1997.
- [16] J. Kolnik, İ. H. Oğuzman, K. F. Brennan, R. Wang, P. P. Ruden, and Y. Wang, “Electric transport studies of bulk zincblende and wurtzite phases of GaN based on an ensemble Monte Carlo calculation including a full zone band structure”, *J. Appl. Phys.*, 78, 1033, 1995.
- [17] C. Bulutay, B. K. Ridley, and N. A. Zakhleniuk, “Full-band polar optical phonon scattering analysis and negative differential conductivity in wurtzite GaN”, *Phys. Rev. B*, 62, 15754, 2000.
- [18] B. C. Lee, K. W. Kim, M. Dutta, and M. A. Stroscio, “Electron-optical-phonon scattering in wurtzite crystals”, *Phys. Rev. B*, 56, 997, 1997.
- [19] P. Y. Yu and M. Cardona, “Fundamentals of Semiconductors: physics and materials properties, 3rd edition”, (Springer, New York, 2001).
- [20] M. V. Fischetti and S. E. Laux, “Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space-charge effects”, *Phys. Rev. B*, 38, 9721, 1988.
- [21] R. Akis, M. Dür, and S. M. Goodnick, “The electron-phonon scattering rate of zinc blende GaN”, *Physica B*, 314, 42, 2002.
- [22] W. Fawcett, A. D. Boardman, and S. Swain, “Monte Carlo determination of electron transport properties in gallium arsenide”, *J. Phys. Chem. Solids*, 31, 1963, 1970.
- [23] K. F. Brennan, E. Bellotti, M. Farahmand, J. Haralson II, P. P. Ruden, J. D. Albrecht, and A. Sutandi, “Materials theory based modeling of wide band gap semiconductors: from basic properties to devices”, *Solid-State Electron.*, 44, 195, 2000.
- [24] B. K. Ridley, “Quantum Processes in Semiconductors, 4th edition”, (Oxford Science, Oxford, 1999).
- [25] V. W. L. Chin, T. L. Tansley, and T. Osotchan, “Electron mobilities in gallium, indium, and aluminum nitrides”, *J. Appl. Phys.*, 75, 7365, 1994.
- [26] D. Chattopadhyay and H. J. Queisser, “Electron scattering by ionized impurities in semiconductors”, *Rev. Mod. Phys.*, 53, 745, 1981.
- [27] M. Leszczynski, T. Suski, H. Teisseyre, P. Perlin, I. Grzegory, J. Jun, S. Porowski, and T. D.

- Moustakas, "Thermal expansion of gallium nitride", J. Appl. Phys., 76, 4909, 1994.
- [28] C. D. Lee, V. Ramachandran, A. Sagar, R. M. Feenstara, D. W. Greve, W. L. Sarney, L. S. Riba, D. C. Look, S. Bai, W. J. Choyke, and R. P. Devaty, "Properties of GaN epitaxial layers grown on 6H-SiC(0001) by plasma-assisted molecular beam epitaxy", J. Electron. Mater., 30, 162, 2001.
- [29] M. Seon, T. Prokofyeva, M. Holtz, S. A. Nikishin, N. N. Faleev, and H. Temkin, "Selective Growth of High Quality GaN on Si(111) Substrates," Appl. Phys. Lett., 76, 1842, 2000.
- [30] A. F. Wright and U. Grossner, "The effect of doping and growth stoichiometry on the core structure of a threading edge dislocation in GaN", Appl. Phys. Lett., 73, 2751, 1998.
- [31] N. G. Weimann, L. F. Eastman, D. Doppalapudi, H. M. Ng, and T. D. Moustakas, "Scattering of electrons at threading dislocations in GaN", J. Appl. Phys., 83, 3656, 1998.
- [32] N. Sano, and A. Yoshii, "Impact-ionization theory consistent with a realistic band structure of silicon", Phys. Rev. B, 45, 4171, 1992.
- [33] R. Wang, P. P. Ruden, J. Kolnik, İ. Oğuzman, and K. F. Brennan, "Dielectric functions of wurtzite and zincblende structure GaN", Mat. Res. Soc. Symp. Proc, 395, 601, 1996.
- [34] M. Stobbe, R. Redmer, and W. Schattke, "Impact ionization rate in GaAs", Phys. Rev. B, 49, 4494, 1994.
- [35] J. Kolnik, İ. H. Oğuzman, K. F. Brennan, R. Wang, and P. P. Ruden, "Calculation of the wave-vector-dependent interband impact-ionization transition rate in wurtzite and zinc-blende phases of bulk GaN", J. Appl. Phys., 79, 8838, 1996.

第3章 フルバンド構造を用いた電子輸送解析

3-1 はじめに

この章では、キャリア輸送を記述するボルツマン輸送方程式(Boltzmann transport equation)について述べる。ボルツマン輸送方程式の解法には、大別して、ボルツマン輸送方程式に近似を施し簡略式として解く流体型(ドリフト・拡散型: drift-diffusion model)と、モンテカルロ法(Monte Carlo method)を用いてボルツマン輸送方程式を統計的に解く粒子型の2つの方法がある。ドリフト・拡散型のシミュレーションでは、キャリアの挙動をマクロ量として扱い、電流連続の式とポアソン方程式(Poisson equation)を解くことによって解を得る[1]。この方法は低電界領域のデバイス解析には有効であるが、半導体の高次のバンド構造や高電界効果を反映させることが困難である。このため、ドリフト・拡散型のシミュレータはナノメートル級の微細寸法デバイスや高電圧下でのデバイス解析には適さない。一方、モンテカルロシミュレーションでは、キャリアの散乱過程を個別に決定し、その走行過程を半導体のバンド構造に基づき逐一追跡する[2]。そのため、このモデルでは、半導体の高次のバンド構造や高電界効果を考慮することができる。しかし、電子を個別粒子（またはその集合体）として扱うため、統計的な揺らぎが生じる。この影響を抑えるためには、多数の粒子を用いると同時に、キャリアの輸送を長時間に亘って追跡する必要がある。したがって、一般に、モンテカルロシミュレーションはドリフト・拡散型シミュレーションに比べて、膨大な計算時間を要する。窒化物半導体デバイスに期待される高周波あるいは高電圧動作を正確に計算するためには、高電界効果を正しく扱う必要がある。そのため、本研究では、ボルツマン輸送方程式の解法として、詳細なバンド構造に基づくキャリア輸送解析が可能なモンテカルロ法を採用した。

モンテカルロ法を用いた GaN の輸送解析は Littlejohn らによって初めて行われた[3]。彼らの計算は、単一バンド構造のみが考慮したものであったが、GaN が 100 kV/cm の高電界で 2×10^7 cm/s の高いピーク電子速度を有するという特徴を示した。Gelmont らは Γ 谷に U 谷を加えた 2 つの非放物線性バンド構造を考慮したモデルを用いることにより、高電界下では、谷間散乱が支配的であることを示した[4]。Bhupkar と Shur は、より精度の高い多バンド構造モデルに基づいた計算を行うことにより、速度-電界特性における不純物濃度や温度依存性を議論した[5]。しかし、非放物線性を取り入れた多バンド構造モデルを用いた場合でさえ、バンド間の電子状態のエネルギーを正確に表現することはできない。さらには、第2章で示したように、高次のエネルギー構造は複雑であり、有効な解析的表現は行われていない。このため、数値計算した半導体のバンド構造を直接的に考慮する方法が利用され始めた。フルバンド構造を取り入れた輸送解析は Kolnik らによって行われた[6]。彼らは、

閃亜鉛鋅構造とウルツ鋅構造 GaN それぞれについてフルバンド構造とそれを用いた電子輸送特性の計算を行うことにより、ウルツ鋅構造結晶が、閃亜鉛鋅構造結晶に比べて、谷間遷移が起こり始める電界が低いことや高次のバンド指数に電子が遷移しやすいことを示した。

3-2 節では、モンテカルロ法に基づくボルツマン輸送方程式の計算手法を記述し、3-3 節では、構築した電子輸送解析プログラムによって計算した窒化物半導体(GaN, InN, AlN)の速度-電界特性を示す。また、第 2 章で示した衝突イオン化の提案モデルを用いることにより、GaN の衝突イオン化係数を計算する。また、その結果を厳密モデルおよび従来モデルによる結果と比較して、提案モデルの優位性を示す。

3-2 フルバンド電子輸送解析の計算手法と結果

3-2-1 ボルツマン輸送方程式

電子輸送の解析では電子の波動性を考慮する必要がある。しかし、電子のドブロイ波長に対して、デバイス寸法が十分に大きい場合には、電子の波動性を無視した古典的な粒子の輸送モデルであるボルツマン輸送方程式を用いることができる。ここでボルツマン輸送方程式とは、粒子の分布関数に変化をもたらす全ての相互作用の下で、分布関数の時間変化を記述した方程式であり、次式で表される[7]。

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar} \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f - \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} \quad (3-1)$$

ここで、 f はキャリアの分布関数、 \mathbf{F} はキャリアに働く力、 \mathbf{v} はキャリアの速度、 \hbar はプランク定数である。また、 f は、時刻 t において位置ベクトル \mathbf{r} および波数ベクトル \mathbf{k} をもつ粒子数の割合を与える確率である。式(3-1)右辺の第 1, 2, 3 項は、(i)外力による分布関数の変化, (ii)拡散による分布関数の変化, (iii)散乱による分布関数の変化にそれぞれ対応する。

(i) 外力による分布関数の変化

いま、散乱がなく、電子濃度が一様で温度勾配もない無限に長い媒質に対して、電子に電界や磁界などの外力 \mathbf{F} を印加した場合を考えると、分布関数の時間変化は波数ベクトル \mathbf{k} のみで表すことができる。つまり、分布関数の位置ベクトルは一定としてよい。この場合、時刻 t における電子の波数ベクトル \mathbf{k} は、時間 Δt 後には、次式で表される波数ベクトル \mathbf{k}' に変化すると考えられる。

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} - \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} \Delta t \quad (3-2)$$

このときの分布関数は時刻 $t + \Delta t$ における分布関数に等しいはずである。すなわち、

$$f\left(\mathbf{r}, \mathbf{k} - \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} \Delta t, t\right) = f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t + \Delta t) \quad (3-3)$$

となる。式(3-3)の左辺をテーラー展開(Taylor expansion)すると、

$$\begin{aligned} f\left(\mathbf{r}, \mathbf{k} - \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} \Delta t, t\right) &= f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} \Delta t + \Lambda \\ &= f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - \frac{1}{\eta} \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f \Delta t + \Lambda \end{aligned} \quad (3-4)$$

となる。ここで、

$$\mathbf{F} = \eta \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} \quad (3-5)$$

である。そして、式(3-3)と式(3-4)を用いると、

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_F &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t + \Delta t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\Delta t} \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f\left(\mathbf{r}, \mathbf{k} - \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} \Delta t, t\right) - f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\Delta t} \\ &= -\frac{1}{\eta} \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f \end{aligned} \quad (3-6)$$

となる。この分布関数の時間変化が式(3-1)右辺の第1項(ドリフト項)である。

(ii) 拡散による分布関数の変化

電子濃度や温度に勾配がある結晶中では、電子がそれらの勾配の影響を受け運動し、その位置を変える。このとき、電界や磁界などの外力 \mathbf{F} がないと仮定すると、運動量による分布関数の時間変化は無視でき、位置ベクトル \mathbf{r} による時間変化のみを考慮すればよい。この場合、時刻 t における電子が Δt 後に移動した位置 \mathbf{r}' は

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \Delta t \quad (3-7)$$

と表すことができる。また、このときの分布関数は時刻 $t + \Delta t$ における分布関数と等しいはずである。すなわち、

$$f\left(\mathbf{r} - \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \Delta t, \mathbf{k}, t\right) = f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t + \Delta t) \quad (3-8)$$

となる。式(3-8)の左辺をテーラー展開すると、

$$\begin{aligned} f\left(\mathbf{r} - \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \Delta t, \mathbf{k}, t\right) &= f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \Delta t + \Lambda \\ &= f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f \Delta t + \Lambda \end{aligned} \quad (3-9)$$

となる。ここで、

$$\mathbf{v} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \quad (3-10)$$

である。そして、式(3-8)と式(3-9)を用いると、

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_D &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t + \Delta t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\Delta t} \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f\left(\mathbf{r} - \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \Delta t, \mathbf{k}, t\right) - f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\Delta t} \\ &= -\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f \end{aligned} \quad (3-11)$$

となる。この分布関数の時間変化が式(3-1)右辺の第2項(拡散項)である。

(iii) 格子原子や不純物原子などに起因した散乱による分布関数の変化

分布関数は式(3-6)のドリフト項と式(3-11)の拡散項に加え、格子原子や不純物原子との衝突による散乱によって変化する。散乱機構は次の2通りがあり、それぞれ分布関数に変化を与える。ひとつは、波数ベクトル \mathbf{k}' の状態にあった電子が散乱によって \mathbf{k} の状態に戻って分布関数を増加させる過程(内方散乱過程)である。他方は、 \mathbf{k} の状態にあった電子が散乱によって \mathbf{k}' の状態に遷移して分布関数を減少させる過程(外方散乱過程)である。したがって、散乱による分布関数の正味の増減分は、内方散乱と外方散乱の差分によって決まる。いま、

散乱の前後の分布関数を

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}) &= f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \\ f(\mathbf{k}') &= f(\mathbf{r}, \mathbf{k}', t) \end{aligned} \quad (3-12)$$

とすると、散乱による分布関数の変化(散乱項)は次式で表される。

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = \sum_{\mathbf{k}'} f(\mathbf{k}') [1 - f(\mathbf{k})] S(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - \sum_{\mathbf{k}'} f(\mathbf{k}) [1 - f(\mathbf{k}')] S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (3-13)$$

ここで、式(3-13) の右辺第 1 項は内方散乱による分布関数の増加割合に対応し、第 2 項は外方散乱による分布関数の減少割合に対応する。また、 S は電子が状態 \mathbf{k} から \mathbf{k}' (あるいは \mathbf{k}' から \mathbf{k}) に単位時間当たりに遷移する確率である。

以上のように、式(3-1)のボルツマン輸送方程式は、(i)~(iii)で示した、ドリフト項、拡散項、散乱項の和として表される。ここで、式(3-13)から分かるように、散乱項には、波数ベクトル \mathbf{k}' に対する総和と求めるべき分布関数自身が内部に含まれる。そのため、ボルツマン輸送方程式を直接解くことは困難であり、ドリフト・拡散型の近似解法やモンテカルロ法が使用される。

3-2-2 モンテカルロ法に基づくボルツマン輸送方程式の解法

モンテカルロ法に基づくボルツマン輸送方程式の計算では、分布関数の時間変化をドリフト項、拡散項と散乱項に分け、散乱項を次のように決定する。いま、時刻 $t=0$ で、電子が波数ベクトル \mathbf{k} を有するとき、その電子状態に対する単位時間当たりの全散乱確率を S_{tot} とする。このとき、その電子が自由走行によって、時刻 $t=0$ から次の散乱を起こすまでの時間を dt とすると、その電子が散乱の影響を受けない確率 W は、次式で与えられる[8]。

$$W(dt) = S_{tot}(\mathbf{k}) \exp\left(-\int_0^t S_{tot}(\mathbf{k}) dt'\right) dt \quad (3-14)$$

ここで、 S_{tot} は第 2 章で述べたフォノン散乱やクーロン散乱などの各散乱機構の散乱確率の和である。すなわち、

$$\begin{aligned}
S_{\text{tot}}(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'=0} [S_{\text{POP}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + S_{\text{DF}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + \Lambda + S_{\text{imp}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')] + S_{\text{ii}}(\mathbf{k}) \\
&= S_{\text{POP}}(\mathbf{k}) + S_{\text{DF}}(\mathbf{k}) + \Lambda + S_{\text{imp}}(\mathbf{k}) + S_{\text{ii}}(\mathbf{k})
\end{aligned} \tag{3-15}$$

で与えられる。ここで、衝突イオン化の遷移確率 S_{ii} のバンド指数の表記は省略した。第 2 章で確認したように、散乱確率は \mathbf{k} に依存し、その値が変化する。そのため、 S_{tot} は一定値ではない。そこで、式(3-15)で考慮した各種散乱機構に加えて、散乱過程が起こらない場合を電子状態の変化が生じない仮想的な散乱(自己散乱)機構として仮定し、その散乱確率を S_{vir} とする。自己散乱を考慮することにより、全散乱確率 S_{tot}' は、次式のように表すことができる。

$$S_{\text{tot}}'(\mathbf{k}) = S_{\text{POP}}(\mathbf{k}) + S_{\text{DF}}(\mathbf{k}) + \Lambda + S_{\text{ii}}(\mathbf{k}) + S_{\text{vir}}(\mathbf{k}) = S_0 \tag{3-16}$$

ここで、 S_0 は、第 1 ブリルアンゾーン内の全ての電子状態の中で最も高い散乱確率の値に相当する。式(3-16)から分かるように、自己散乱を考慮した全散乱確率 S_{tot}' は定数 S_0 として定義される。式(3-16)を式(3-14)に代入することにより、式(3-14)は次式のように置き換えられる[8]。

$$W(t) = S_0 \exp(-S_0 t) \tag{3-17}$$

式(3-17)の両辺に $1/S_0$ を掛けると、

$$W'(t) = \frac{W(t)}{S_0} = \exp(-S_0 t) \tag{3-18}$$

となる。式(3-18)について、 $t=0$ の場合、

$$W(0) = S_0 \tag{3-19}$$

であり、一方、 $t \gg 1/S_0$ の場合、

$$W(t) \approx 0 \tag{3-20}$$

である。すなわち、式(3-18)で与えられる確率 W' は、

$$0 \leq W'(t) \leq 1 \tag{3-21}$$

となる。ここで、 $t=0$ の場合、電子は自由走行をしていないので、フォノン散乱などの各種散乱機構によって生じる電子状態の変化が起こらないことを意味する。言い換えると、自己散乱過程のみが選択される。(このとき、 $W=1$ である。) 一方、 $t > 0$ の場合、 t の増加とともに、自己散乱過程以外の散乱機構が選択される可能性が増加する。(このとき、 $0 < W'(t) \leq 1$ である。) したがって、0 から 1 の間の値を取る一様乱数 P と W' の大小関係を比較することにより、任意の t についての散乱の有無を決定することが可能となる。一様乱数 P と W の比較によって決定する散乱機構をまとめると、

- (i) $P(t) > W'(t)$ の場合、 自己散乱
- (ii) $P(t) \leq W'(t)$ の場合、 自己散乱以外の散乱

となる。ここで、(ii) の自己散乱以外の散乱が選択された場合、第 2 章で述べた各種散乱機構のいずれかが起こることを意味するので、散乱機構の種類を決定する必要がある。散乱機構の種類の決定には、一様乱数と規格化した散乱確率 $S_{\text{POP|nor}}$, $S_{\text{DF|nor}}$, \dots , $S_{\text{ii|nor}}$ を利用する。このとき使用する一様乱数は、 P とは異なる新たな一様乱数 P' ($0 \leq P' \leq 1$) を用いる。また、規格化した散乱確率は各散乱機構の散乱確率を式(3-15)で定義した全散乱確率 S_{tot} で割ったものに相当し、それらの総和 $S_{\text{tot|nor}}$ は、

$$S_{\text{tot|nor}}(\mathbf{k}) = S_{\text{POP|nor}}(\mathbf{k}) + S_{\text{DF|nor}}(\mathbf{k}) + \Lambda + S_{\text{ii|nor}}(\mathbf{k}) + S_{\text{vir|nor}}(\mathbf{k}) = 1 \quad (3-21)$$

を満足する。したがって、 $S_{\text{tot|nor}}$ から規格化した遷移確率を順に減算した値と P' との大小関係を比較することにより、散乱機構の種類を決定することができる。有極性光学フォノン散乱が選択される場合を例として挙げると、その関係は、

- (i) $S_{\text{tot|nor}}(\mathbf{k}) - S_{\text{pop|nor}}(\mathbf{k}) < P' \leq S_{\text{tot|nor}}(\mathbf{k})$ の場合、 有極性光学フォノン散乱
- (ii) $P' \leq S_{\text{tot|nor}}(\mathbf{k}) - S_{\text{pop|nor}}(\mathbf{k})$ の場合、 他の散乱機構

となる。(ii) の場合は、次の散乱機構について、同様の操作を順次繰り返す。この方法で、散乱機構の種類が決定される。また、ここでは、散乱機構の決定を、 $S_{\text{tot|nor}}$ からおのおのの規格化した散乱確率を減算していく方法を示したが、加算していくことでも可能である(その場合、ゼロから始める)。ここまでの、散乱機構の種類を決定することができた。最後に、散乱によって遷移する電子状態を決定する。遷移後の電子状態決定にも、一様乱数を用いた方法が利用される。例えば、有極性光学フォノン散乱の場合、 $[S_{\text{pop|nor}}(\mathbf{k}) - S_{\text{pop|nor}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')]]$ と P'' の大小関係の比較によって、遷移後の電子状態 \mathbf{k}' が決定される。このように、モンテカルロ法を利用することにより、ボルツマン輸送方程式の散乱項の計算が可能となる。

3-2-3 輸送解析における電子状態の選択

電子はドリフト運動あるいは散乱によってその電子状態を変化する。この節では、第 2 章で計算したフルバンド構造に基づいて、運動量空間内の任意の電子状態を決定する方法について述べる。フルバンド構造を利用したもっとも容易な方法は経験的擬ポテンシャル法によるバンド構造計算や散乱確率などを直接取り込むことである。その場合、電子状態が変化するたびに、数値計算処理が必要であり、バンド構造を解析的に扱う簡略モデルに比べて、大幅な計算時間が要求される。そこで、計算時間の増加を抑制する方法として、一般に、エネルギーバンド構造、状態密度、散乱確率などのパラメータ(フルバンドパラメータ)をあらかじめ個別に計算し、それらの結果を数値データ表として用いる方法が利用されてきた[9]。ここで、数値データ表は、運動量空間内の第一ブリルアンゾーン内の全電子状態に対して計算したフルバンドパラメータをまとめたものである。また、第一ブリルアンゾーンの対称性を考慮することにより、ウルツ鉱構造結晶では、必要となるデータ表は 24 分の 1 の還元したブリルアンゾーンのものにまで縮小できる。ただし、還元したブリルアンゾーンを用いる場合、(1) 第一ブリルアンゾーン内にある任意の電子状態を、還元したブリルアンゾーン内の対応する電子状態に置き換える操作と、(2) 還元した領域で、ドリフト運動や散乱によって変化した電子状態を決定し、更新した電子状態を還元領域へ置き換える前の電子状態に相当する電子状態へ置き戻す操作が必要である。そのため、(1)と(2)の操作に対して、それぞれ、回転座標変換や鏡映変換を行うことが必要であり、プログラムが複雑になる。本研究では、データ表の縮小ができ、かつ、(1)と(2)の変換処理を容易に行うことができる 8 分の 1 の還元したブリルアンゾーン領域、すなわち、 $k_x \geq 0, k_y \geq 0, k_z \geq 0$ を考慮した。この場合、電子状態の(1) 置き換え、あるいは、(2) 置き戻しの操作は、置き換え前の始状態の電子の符号を考慮するのみで済む。例えば、電子状態 $\mathbf{k}_1=(k_{x1}, k_{y1}, k_{z1})$ の電子について、その電子状態が変化する場合を考える。ここで、 $k_{x1}>0, k_{y1}>0, k_{z1}<0$ とする。

(1) 置き換え操作について

始状態 \mathbf{k}_1 の電子を 8 分の 1 の還元したブリルアンゾーン領域に移すためには、 k_{z1} に -1 を掛ければよい。したがって、置き換え操作に用いるベクトル \mathbf{a}_0 は $\mathbf{a}_0=(1, 1, -1)$ である。置き換え操作によって、始状態電子は $\mathbf{k}_1'=(k_{x1}, k_{y1}, -k_{z1})$ の状態となる。 \mathbf{k}' に対して、ドリフト運動や散乱によって変化する電子状態を計算する。その電子状態を $\mathbf{k}_2=(k_{x2}, k_{y2}, k_{z2})$ とする。ここで、ドリフト運動の場合、 \mathbf{k}_2 は式(3-2), (3-5)によって導出される。また、散乱の場合、3-2-2 節で述べた一様乱数を利用した散乱機構の選択方法によって、 \mathbf{k}_2 を決定する。

(2) 置き戻し操作について

(1)の操作で定義した \mathbf{a}_0 ベクトルを、決定した電子状態 \mathbf{k}_2 に掛ける。これが置き戻し操作であり、その電子状態 \mathbf{k}_2' は $\mathbf{k}_2'=(k_{x2}, k_{y2}, -k_{z2})$ となる。 \mathbf{k}_2' が、始状態 \mathbf{k}_1 の電子に対する遷

移後の状態に相当する。

以上のように、8分の1の還元したブリルアンゾーン領域を用いた場合、置き換えと置き戻しの操作がどちらも容易であり、プログラムの簡略化が可能である。しかし、1/8の還元領域は、1/24の最小還元領域を利用した場合と比較すると、数値データ表のメモリが大きいという欠点をもつ。また、還元したブリルアンゾーンを考慮しても、電子状態を連続的に選択した場合の計算は実用上不可能である。実際には、離散的に選択した電子状態に対して、数値データ表を作成する。本論文では、還元したブリルアンゾーンの波数ベクトル k_x, k_y, k_z 成分をそれぞれ等間隔に分割し、分割したときにできる各々交点(メッシュ点)の電子状態に対して、数値データ表を作成した。メッシュ点の取り方の例として、図 3-1 に(a) k_x - k_y 平面上の 8分の1の還元したブリルアンゾーンの k_x, k_y, k_z 成分について、それぞれ 10 等分したときにできるメッシュ点と、(b) ブリルアンゾーンの境界上の拡大図を示す。ここで、 e_1, e_2 は任意の電子の電子状態を意味する。また、ブリルアンゾーンの境界上では、図 3-1 (b) に示すように、一部のメッシュ点を省略した。この理由は後述する。輸送解析では、メッシュ点に対して作成した数値データ表を以下に示す方法に適用することにより、任意の電子状態を決定する。電子状態の決定方法は、次の 2 つの操作から成る。

(i) e_1 の電子状態を囲む近接した 8 個のメッシュ点を決定する。図 3-1 (a)中の e_1 について、それら 8 個のメッシュ点から構成される微小体積は直方体となる。この様子を図 3-2 に (a) e_1 の電子状態を囲む近接した 4 個のメッシュ点の二次元(k_x - k_y 平面上)プロットと(b) e_1 の電子状態を囲む近接した 8 個のメッシュ点の三次元(運動量空間上) プロットとして示す。

(ii) 選択した 8 つのメッシュ点とそのとき構成される微小体積を用いることにより、 e_1 の電子状態を計算する。まず、この電子状態の計算方法を、図 3-2 (a)で示した 2 次元プロットで説明する。メッシュ点 $i_1 \sim i_4$ のフルバンドパラメータは、データ表から読み取ることができる既知の値であり、これらの値と図 3-2 (a)に示した面積 $S_1 \sim S_4$ を用いることにより、 e_1 のフルバンドパラメータ、例えば、エネルギーは次式のように表される。

$$E(e_1) = \frac{\sum_{j=1}^4 S_{s-j} E(i_j)}{\sum_{j=1}^4 S_j} \quad (3-22)$$

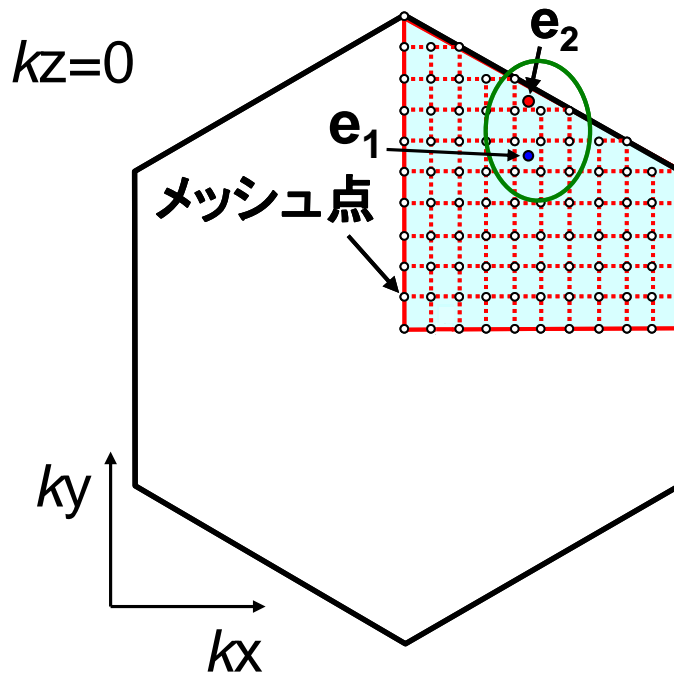
ここで、 $E(i_j)$ は各メッシュ点の電子エネルギーであり、添え字 j はメッシュ点番号を意味する。また、状態密度や散乱確率などを計算したい場合は、 E と置き換えればよい。一方、3 次元の場合には、面積比を体積比に拡張すればよい。すなわち、図 3-2 (b)に示したように、

8つのメッシュ点のエネルギーの値と体積 $V_1 \sim V_8$ を用いて、 e_1 のエネルギーは

$$E(e_1) = \frac{\sum_{j=1}^8 V_{9-j} E(i_j)}{\sum_{j=1}^8 V_j} \quad (3-23)$$

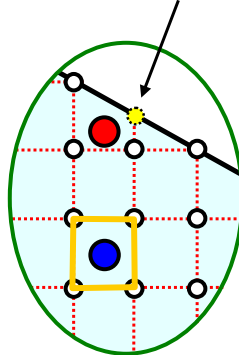
として与えられる。

以上のように、(i) 電子状態を囲む 8 個の近接したメッシュ点の決定と、(2) 体積比を用いた計算(式(3-23))の 2 つの操作を行うことにより、第一ブリルアンゾーン上の任意の電子状態を決定することができる。ただし、図 3-1 (a)から分かるように、ウルツ鉱構造では、メッシュ点によって構成される微小体積が直方体にならない領域が、第一ブリルアンゾーン境界付近に存在する。この領域に対して、微小体積が一律 (直角三角形を底面とする三角柱) となるように、境界上の一部のメッシュ点を省略した(図 3-1 (b))。また、三角柱の微小体積内に任意の電子(e_2)が存在した場合、6つのメッシュ点と微小体積を用いて、式(3-23)のような体積比を用いることにより、その電子の物理パラメータを決定する。



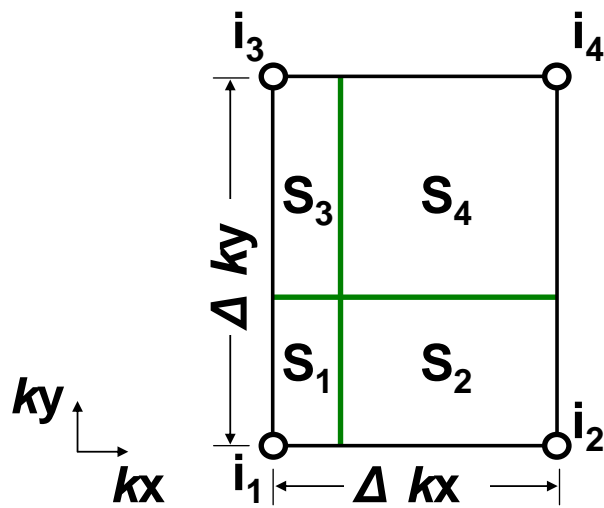
(a)

1st BZ境界上の一部
データ化から除外

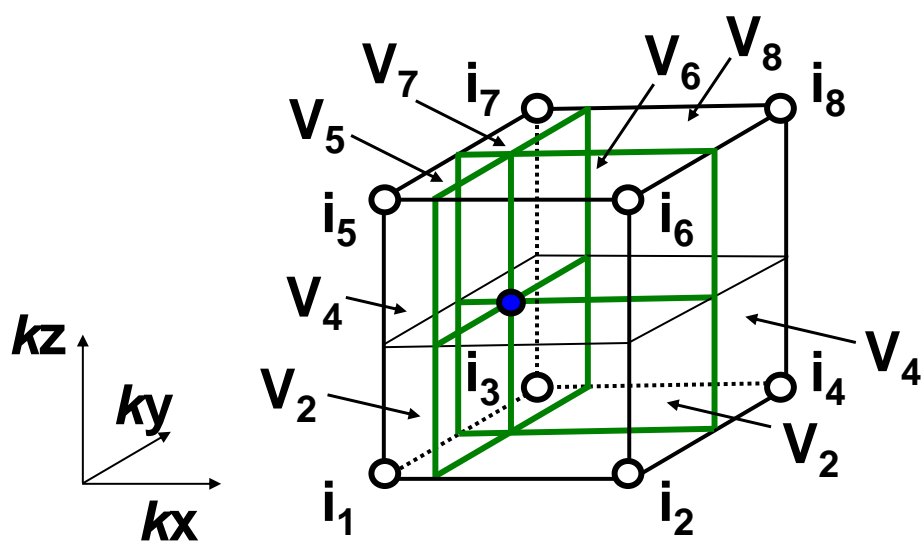


(b)

図 3-1 (a) kx - ky 平面上の 8 分の 1 の還元したブリルアンゾーンの kx , ky , kz 成分について、それぞれ 10 等分したときのできるメッシュ点と (b) ブリルアンゾーンの境界上の拡大図



(a)



(b)

図 3-2 に (a) e_1 の電子状態を囲む近接した 4 個のメッシュ点の二次元(kx - ky 平面上) プロットと(b)運動量空間内 e_1 の電子状態を囲む近接した 8 個のメッシュ点の三次元 (運動量空間上) プロット

上述した方法を用いることにより、電子状態の決定が可能である。しかし、数値データ表は第一ブリルアンゾーンの電子状態に対してのみ対応しているので、電子がドリフト運動によって、その電子状態が第一ブリルアンゾーンの外、すなわち、第二ブリルアンゾーン、第三ブリルアンゾーン、…へと移った場合には、その電子状態を第一ブリルアンゾーンに還元する必要がある。還元方法は、以下に示すように、(1) 電子状態が第一ブリルアンゾーンに存在するか否かの判定を行い、還元が必要な場合には、(2) 電子状態の第一ブリルアンゾーンへの還元操作を行うというものである。

(1) 電子状態 $\mathbf{k}_1=(kx_1, ky_1, kz_1)$ の電子が第一ブリルアンゾーンに存在するか否かの判定をするために、 \mathbf{k}_1 に関する3つの不等式を比較する。ここで、 k_i は規格化した波数ベクトルである。

$$\begin{aligned} |kx_1| &\leq \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}}|kx_1| + |ky_1| &\leq \frac{2}{3} \\ |kz_1| &\leq \frac{1}{2} \end{aligned} \tag{3-24}$$

\mathbf{k}_1 が式(3-24)を全て満たす場合、 \mathbf{k}_1 は第一ブリルアンゾーンに存在する。一方、どれかひとつでも満たさない場合、 \mathbf{k}_1 を第一ブリルアンゾーンへ還元する操作が必要である。

(2) 電子状態を第一ブリルアンゾーン内へ還元するには、第2章の式(2-29)で示した逆格子ベクトルを用いて、

$$\begin{aligned} |kx_1 + Gx| &\leq \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}}|kx_1 + Gx| + |ky_1 + Gy| &\leq \frac{2}{3} \\ |kz_1 + Gz| &\leq \frac{1}{2} \end{aligned} \tag{3-25}$$

を満たす \mathbf{G} 、すなわち、式(2-29)に示した A_1, A_2, A_3 を決定する。結果として、第一ブリルアンゾーンに還元した波数ベクトル $\mathbf{k}_1'=(kx_1+Gx, ky_1+Gy, kz_1+Gz)$ が得られる。

3-2-4 電子輸送解析プログラム

実際の計算手順として、図 3-3 に電子輸送解析のフローチャートを示す。

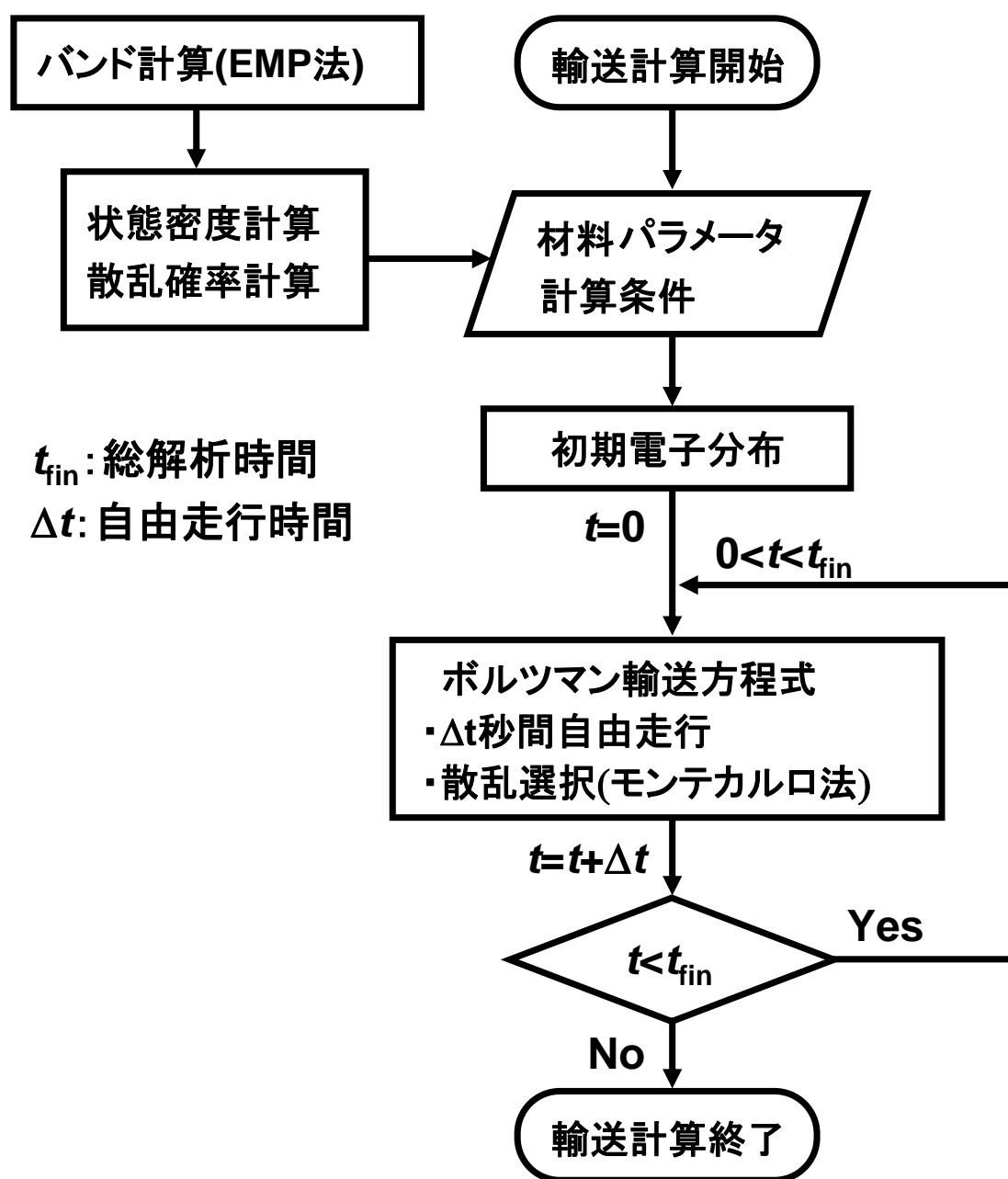


図 3-3 フルバンド電子輸送解析プログラムのフローチャート

(i) バンド計算によって作成したデータ表(エネルギーバンド構造、状態密度、散乱確率、

など)と材料パラメータを読み込む。ここで、材料パラメータとは、格子定数、比誘電率、フォノンエネルギーなどの物性値を指す。また、電界、格子温度、キャリア濃度や自由走行時間などの計算条件を入力する。ここでは、一定量の電子を1つの粒子と考えて、多数の粒子を扱う多粒子モンテカルロ法を用いているため、粒子数も計算条件として入力する。ここで、1粒子あたりの電子数(N_{nor})は次式で与えられる。

$$N_{\text{nor}} = \frac{n}{N_{\text{par}}} \quad (3-26)$$

ここで、 n はキャリア濃度、 N_{par} は粒子数である。

(ii) 定義した粒子数に従って、粒子の初期分布を決定する。ここで、初期分布($t=0$)の場合のみ、熱平衡状態を仮定し、初期分布はフェルミ-ディラック分布(Fermi-Dirac distribution)に従うものとする。初期分布の決定手順は、まず、規格化したフェルミ-ディラック分布関数と一様乱数を用いて、電子エネルギーを選択する。次に、そのエネルギーに対応する全ての電子状態の中から、新たな一様乱数を発生させ、バンド指数(i_0)と波数ベクトル(\mathbf{k})を決定する。このような処理を入力した粒子数に対して行うことで、初期分布が得られる。

(iii) 運動量空間のみを考慮する輸送解析では、ボルツマン輸送方程式のドリフト項と散乱項による分布関数の時間変化を考える。すなわち、ドリフト項と散乱項に分けての次の2つの処理を行う。

(iii*) 定義した自由走行時間と印加電界を式(3-2), (3-5)に適用して、波数ベクトル \mathbf{k} を \mathbf{k}' に更新をする。

(iii**) 3-2-2 節で述べた、モンテカルロ法を用いた方法によって、散乱機構を決定する。自己散乱が選ばれた場合は、(iii*)の電子状態を維持する。自己散乱以外が選択された場合、まず、各種散乱機構の中から種類の決定を行い、次に、遷移後の電子状態の決定を行う。ここで、散乱機構の種類や遷移後の電子状態の決定に用いられる一様乱数は、各処理で新たに発生させる。

(iii*), (iii**)の処理を、全ての粒子に対してそれぞれ行った後、次の処理に移る。

(iv) 累積走行時間に自由走行時間を加算する。

(v) 累積走行時間が、(i)で設定した総走行時間に達しているかを判別する。達した場合は、輸送解析終了となり、達していない場合は(iii)の処理に戻す。

3-3 窒化物半導体の電子輸送解析結果

3-3-1 速度-電界特性

この節では、3-1 節で述べたフルバンド構造に基づく電子輸送解析によって計算した GaN の速度-電界特性の結果を示す。また、3-2-3 節(輸送解析における電子状態の選択)で述べたメッシュ点について、メッシュ間隔が速度-電界特性の計算結果に与える影響を示す。さらに、同様の方法を用いて計算した AlN, InN の速度-電界特性と GaN のものを比較する。

(i) ウルツ鉾構造 GaN の速度-電界特性

図 3-4 にメッシュ間隔(Δk)が 1/20, 1/40, 1/100 という条件で、それぞれ計算したときの GaN の速度-電界特性を示す。ここで、 Δk は第一ブリルアンゾーンの k_x , k_y , k_z 成分をそれぞれ方向に対して等間隔に分割したときのメッシュ間隔である(図 3-1 (a)の場合、 $\Delta k=1/10$)。また、電子のドリフト速度は全粒子にわたってドリフト速度を平均したものに相当する。結晶欠陥や不純物のない理想結晶のウルツ鉾構造 GaN では、ピーク電子速度は電界が 160 kV/cm のときに 3.2×10^7 cm/s を示した。しかし、 $\Delta k=1/20$ の場合、ドリフト速度のピーク値およびピークに達したときの電界が $\Delta k=1/40$, 1/100 の場合に比べて、どちらも 20% 程度小さい。この理由は Δk が大きすぎるために、式(3-23)を用いて決定する電子状態が不適切な近似になるためである。一方、 $\Delta k=1/40$ の場合の計算結果は、 $\Delta k=1/100$ の場合とほぼ同じ速度-電界特性を示した。このことから、 $\Delta k=1/40$ と 1/100 の条件では、電子状態の近似に大きな違いがないことが分かる。ここで、 $\Delta k=1/100$ の場合、8 分の 1 の還元したブリルアンゾーン内のメッシュ点の数は 772751 となる。一方、 $\Delta k=1/40$ の場合、メッシュ点の数は 51701 であり、 $\Delta k=1/100$ の場合より 1 桁以上小さい。メッシュ点の数が多いと、式(3-23)の操作を行う前の操作、すなわち、電子状態を囲む 8 個の近接したメッシュ点を決定する操作に要する時間が増加する。また、その時間の増加は、1 つ 1 つの粒子の自由走行過程および散乱過程の計算で発生する。結果として、 $\Delta k=1/100$ を用いた速度-電界特性計算は、 $\Delta k=1/40$ の場合に比べて、計算時間が大きく増加する。以上のことから、計算精度と計算時間のトレードオフを考えると、 $\Delta k=1/40$ の格子間隔が計算に適していることが分かった。

次に、図 3-4 に示した速度-電界特性について、3 つの電界領域、すなわち、(1) 電界の増加と共に、電子速度が増加する領域(160 kV/cm 以下の電界)、(2) 電子速度が最大となる電界(160 kV/cm)、(3) 電子速度が減少する領域(160 kV/cm 以上の電界)の結果を比較する。図 3-5 に(a) ドリフト速度と(b) 平均電子エネルギーの電子走行時間依存性を示す。電子が走行を開始してから 10fs までの間は、走行時間の増加にともなって、電子速度とエネルギーはどちらも増加する。そして、電子速度とエネルギーの増加率は印加電界が大きいほど高い。また、500 kV/cm の電界では、10fs の輸送時間で、電子速度が約 4.5×10^7 cm/s に達し、それは図 3-4 で示した速度-電界特性のピーク速度(3.2×10^7 cm/s)より高いことが分かる。これは

非定常状態に起こる現象であり、速度オーバーシュート(velocity overshoot)と呼ばれる。速度オーバーシュートが起きているときの電子エネルギーは約 0.8 eV である。GaN のバンド構造(図 2-4 (a))と比較すると、このエネルギーでは、電子が Γ 谷のみに存在することが分かる。また、10fs 以上の走行時間では、電界が 50, 160 kV/cm の場合には、電子速度とエネルギーは 30fs まで増加し続け、30fs 以上では、飽和傾向を示す。一方、500 kV/cm の電界では、10~300fs の間、電子速度は減少し、それ以降では、速度が飽和する。また、500 kV/cm の電界では、速度が減少する 10~300fs の間、電子の平均エネルギーは増加する。500 kV/cm の電界における計算結果から、高電界で、かつ、電子エネルギーが低い(つまり、ほとんどの電子が Γ 谷のみに存在する)ときにだけ、電子が速度オーバーシュートを起こすことが分かる。この様子を、図 3-6 に電子走行時間が(a) 10fs と(b) 100fs のときの、運動量空間内の電子分布として示す。速度オーバーシュートが起きている 10fs では、電子は第一ブリルアンソンの中心、すなわち、 Γ 点付近にのみ存在する。一方、100fs では、 Γ 点付近の電子分布は広がり、また、バンド指数 1 の L-M 間にある谷へ電子が遷移したことが確認できる。図 3-6 に示すように、電子が Γ 谷よりエネルギーの高い谷へ遷移し始めると電子速度は急激に減少し始める。

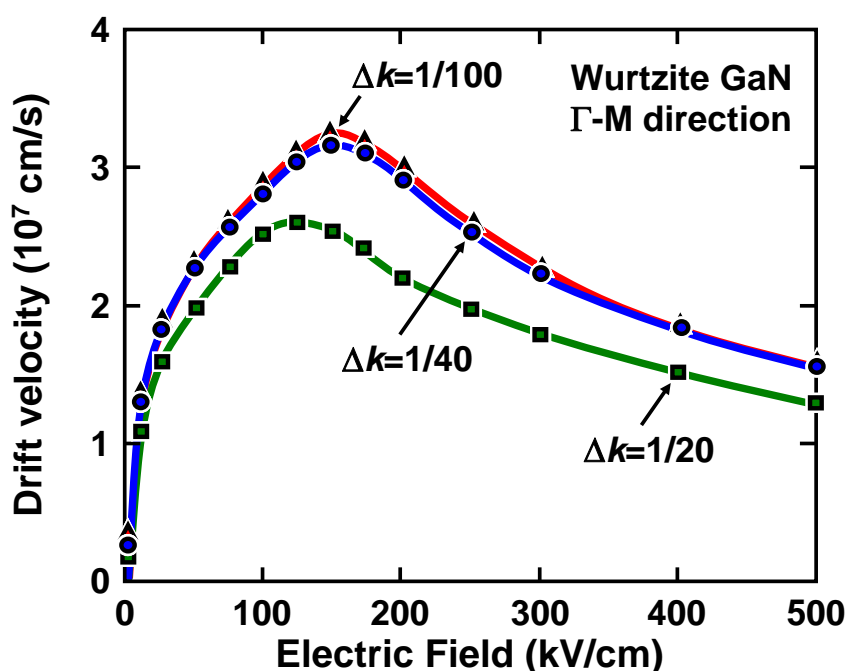
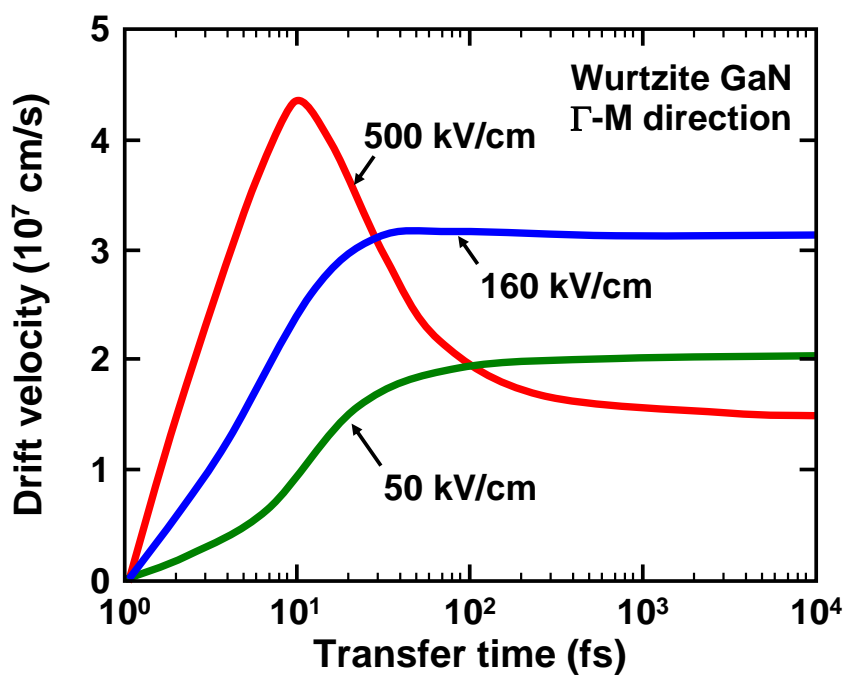
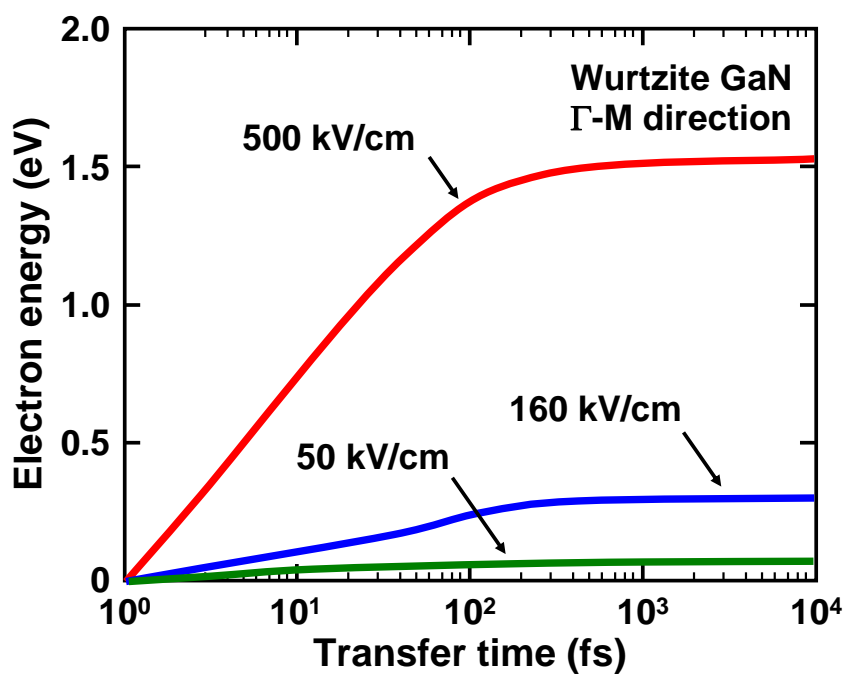


図 3-4 ウルツ鉱構造 GaN の速度-電界特性

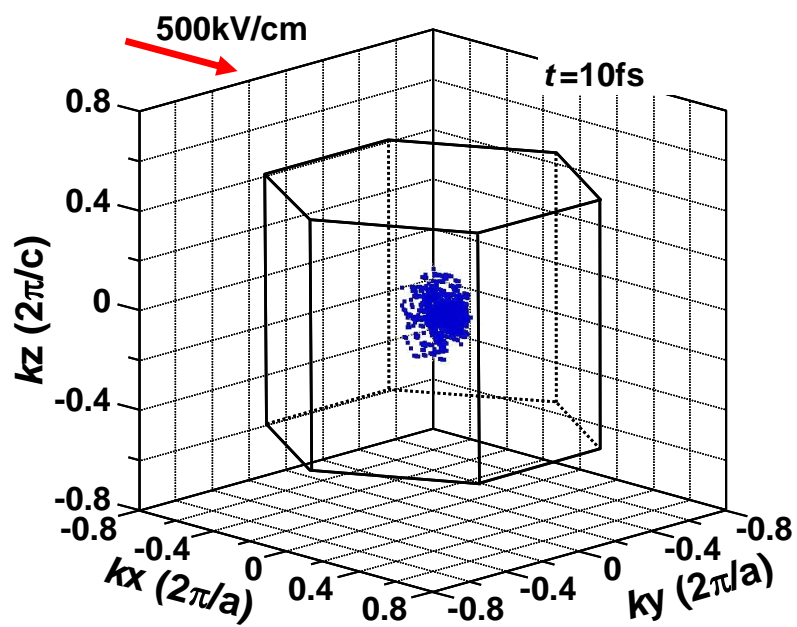


(a)

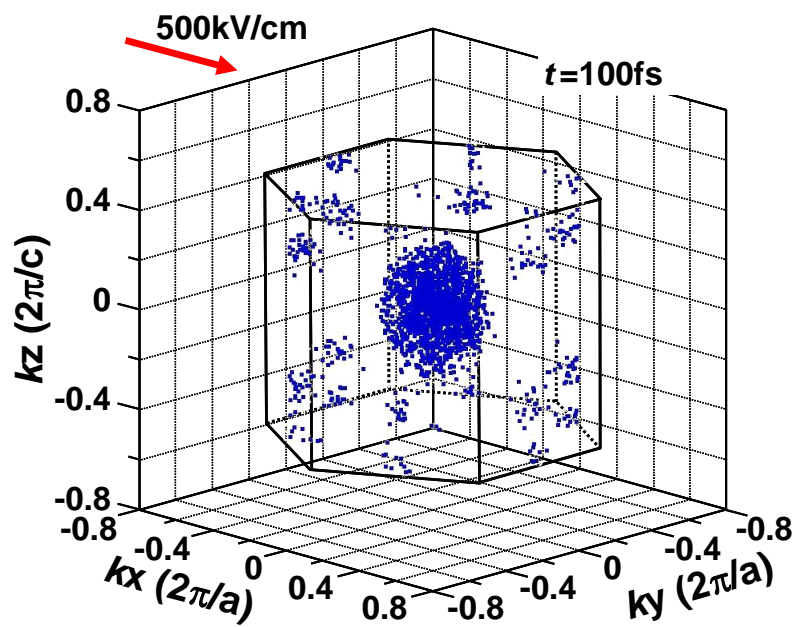


(b)

図 3-5 ウルツ鉱構造 GaN の(a) ドリフト速度と(b)平均エネルギーの
輸送時間依存性



(a)



(b)

図 3-6 (a) 10fs および(b) 100fs 時の運動量空間内の電子分布

図 3-7 に 1, 2, 3 MV/cm の電界下で、それぞれ計算したドリフト速度の輸送時間依存性を示す。電界に依存して、速度オーバーシュート、つまり、非定常領域の最大電子速度の増加が大きい。一方、速度オーバーシュートの持続時間は、電界が増加するにしたがって、短くなる。3 MV/cm の電界では、速度オーバーシュートによる電子速度は、定常状態のピーク速度(3.2×10^7 cm/s)より約 2 倍大きい値(7.2×10^7 cm/s)を示す。

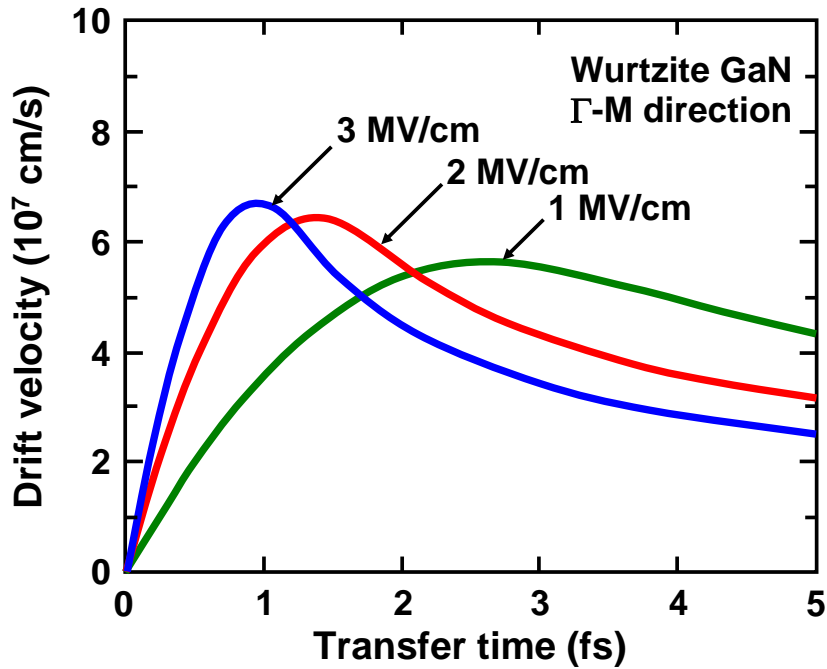
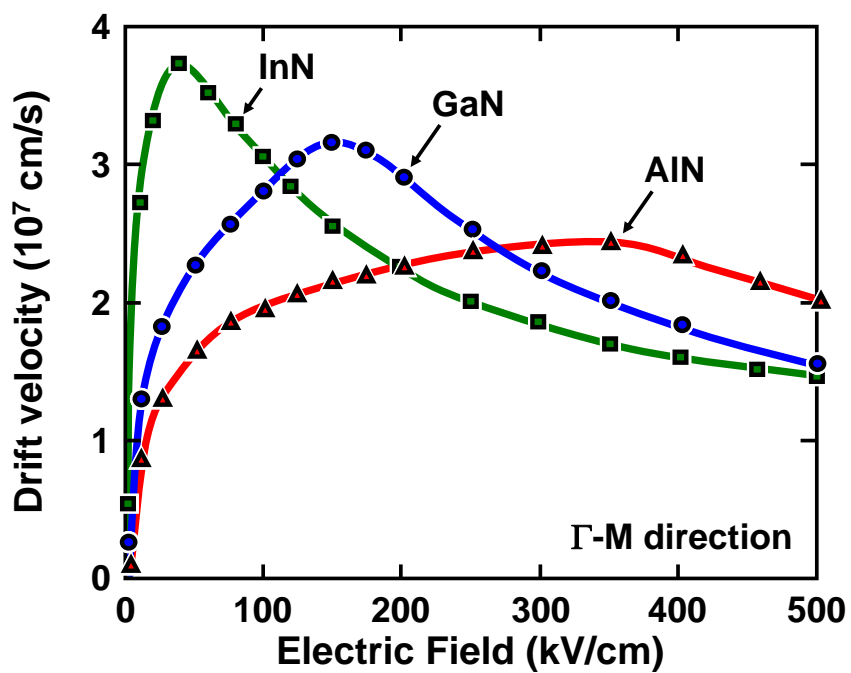


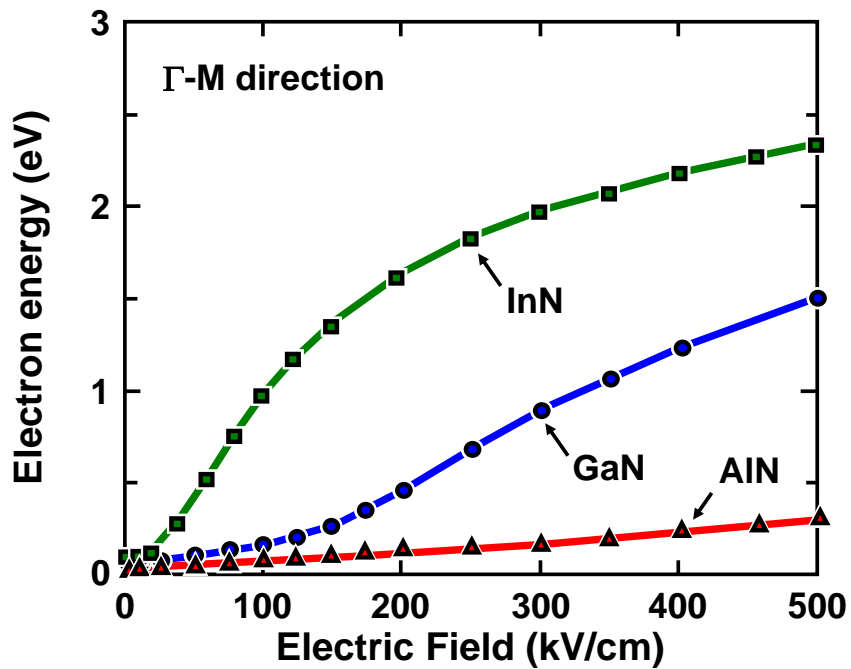
図 3-7 各電界下で計算したウルツ鉱構造 GaN のドリフト速度の輸送時間依存性

(ii) GaN, AlN, InN の速度-電界特性

図 3-8 に GaN, AlN と InN について計算した(a)速度-電界特性と(b)電子エネルギーの電界依存性を示す。InN は、GaN と AlN に比べて、高い移動度(約 $4000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$)と、低電界で高いピーク電子速度(約 $3.8 \times 10^7 \text{ cm/s}$)を示す。この理由は、第 2 章のエネルギーバンド構造に示したように、InN は有効質量が小さく、かつ、 Γ 谷の底と L-M 間の谷の底の間のエネルギー差が大きいという特徴をもつためである。前者は高い移動度とピーク速度、後者は高いピーク速度を可能にする。一方、AlN は有効質量が大きいため、電子速度が増加しにくい。また、InN や GaN に比べて、エネルギーの増加が緩やかである。そのため、 Γ 谷の底と L-M 間の谷の底の間のエネルギー差が小さいにもかかわらず(図 2-8)、 350 kV/cm の電界まで、電子が高次の谷へ遷移しない、すなわち、 Γ 谷のみに存在するので、電子速度が増加し続ける。



(a)



(b)

図 3-8 ウルツ鉱構造 GaN, AlN と InN の(a)速度-電界特性と
(b) 電子エネルギーの電界依存性

3-3-2 衝突イオン化係数

この節では、第 2 章で述べた衝突イオン化モデルを考慮した電子輸送解析を行うことにより、衝突イオン化モデルにバンド指数を考慮することが重要であることについて議論する。そこで、電子が単位長さを移動したときに起した衝突イオン化回数、すなわち、衝突イオン化係数(impact ionization coefficient)の電界依存性について、3 つモデル(提案モデル、従来モデル、厳密モデル)の計算結果およびそれに要した計算時間を比較する。衝突イオン化係数の計算では、少数キャリアの影響は十分に小さいので、衝突イオン化によって生成される正孔の輸送計算は無視した[10]。

図 3-9 に計算したイオン化係数の逆電界依存性を示す。ここで、丸印は提案モデルを用いて計算した結果、三角印は従来モデルを用いた結果、そして、四角は厳密モデルの結果である。電界は Γ -M 方向に 2-6 MV/cm の範囲で印加した。厳密モデルで計算した結果は Kolnick らの計算結果[10]や McClintock らの実験結果[11]とよい一致を示した。従来モデルの結果は厳密モデルの結果に比べ、6 倍以上高い値を示し、衝突イオン化係数を過大評価する近似モデルである。一方、提案モデルは厳密モデルに対して、イオン化係数の過大評価を 2~4 倍の範囲内に抑えることができる。衝突イオン化係数の計算結果から、提案モデルは従来モデルに比べて、より高い精度で厳密モデルを近似できることが分かる。3 つのモデルで、イオン化係数が異なる主な原因は、6.5~7 eV の電子エネルギーにおけるバンド指数 4 の電子状態によって起こる衝突イオン化過程の違いである。このエネルギー領域では、従来モデルの遷移確率が提案したモデルのものより 1.5~4 倍高く、また、バンド指数 4 の電子状態が最も高い占有数を示す(図 2-11 (b))。すなわち、従来モデルで計算した遷移確率では、6.5~7 eV の電子エネルギー範囲において占有率が最も高いバンド指数 4 の電子の遷移確率を過剰見積りするため、提案モデルのものに比べ、衝突イオン化が起こりやすい。結果としてイオン化係数が大きくなる。

また、衝突イオン化係数の計算に要する時間を 3 つのモデルで比較する。提案モデルと従来モデルを用いる場合の計算は、衝突イオン化の遷移確率をバンド指数ごとに定義することを除いては、散乱機構の種類の選択および遷移後の電子状態の決定方法が一緒である。そのため、両モデルの計算時間はほとんど同じであった。そして、それらの計算時間は厳密モデルの場合と比べて、十分に短かった。例えば、Intel i7-2600 CPU (3.4 GHz)を搭載した Windows PC を使用して、粒子数 1000, 輸送時間 500 ps, 印加電界 4 MV/cm の条件下で、提案、従来、厳密モデルを用いて衝突イオン化係数の計算した場合、要した計算時間はそれぞれ 42, 42, 575 時間であった。厳密モデルを用いた計算では、10 倍以上の時間を必要としたことから、提案モデルは、(厳密モデルより)十分に短い計算時間で、かつ、(従来モデルより)精度よく衝突イオン化係数の計算ができ、デバイス解析に適用する場合には、従来モデルに比べ、有効な計算手法であることが確認できた。

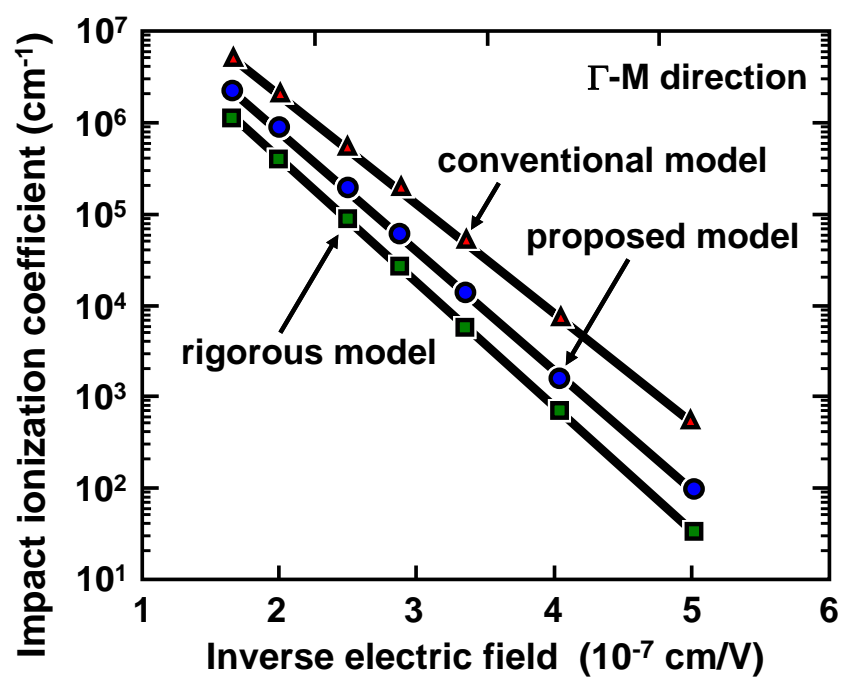


図 3-8 衝突イオン化係数の逆電界依存性

3-3 まとめ

この章では、モンテカルロ法を用いたボルツマン輸送方程式の解法を述べ、電子輸送解析の手法を示した。また、解析手法の中で、電子の自由走行や散乱過程を経て、電子状態が変化する場合の電子状態の決定には、第 2 章で示したエネルギーバンド構造や散乱確率などを数値データ表として用いる方法を採用した。ここで、第一ブリルアンゾーンの対称性を考慮することにより、数値データ表を作成するために考慮した電子状態は、8 分の 1 の還元領域の状態まで縮小した。そのデータ表と微小体積の体積比を用いることにより、第一ブリルアンゾーン内の任意の電子状態が計算可能であることを示した。また、第一ブリルアンゾーン内に電子状態が存在するか否かの判定条件と、第一ブリルアンゾーンへ電子状態を還元する方法を示した。また、構築した電子輸送解析プログラムを用いて、窒化物半導体の速度-電界特性を計算した。運動量空間に考慮するメッシュ間隔 Δk を変化させて、GaN の速度-電界特性を計算した結果、メッシュ間隔 Δk は、 k_x , k_y , k_z 成分それぞれに対して、 $\Delta k_x \leq 1/40$, $\Delta k_y \leq 1/40$, $\Delta k_z \leq 1/40$ にするべきであることが分かった。また、電界の増加に伴って、速度オーバーシュート効果が強まることを示した。特に、3 MV/cm の電界下では、GaN の速度オーバーシュートは定常状態のピーク電子速度の 2 倍高い値に達した。

また、第 2 章で述べた衝突イオン化モデルを用いて、衝突イオン化係数の計算を行った。従来モデルの結果は厳密モデルの結果に比べ、6 倍以上高い値を示し、衝突イオン化係数を過大評価する近似モデルであり、一方、提案モデルはイオン化係数の過大評価を抑えることができる近似モデルであることが分かった。また、厳密モデルを用いた場合、衝突イオン化係数の計算結果を得るのに要した時間は、提案モデルと従来モデルの場合と比べて、10 倍以上であった。衝突イオン化係数の計算を十分に短い計算時間で、かつ、高い精度で行うためには、提案モデルが有効であることを示した。

参考文献

- [1] S. Selberherr, “Analysis and simulation of semiconductor devices”, (Springer-Verlag, Wien, 1984).
- [2] W. Fawcett, A. D. Boardman, and S. Swain, “Monte Carlo determination of electron transport properties in gallium arsenide”, J. Phys. Chem. Solids., 31, 1963, 1970.
- [3] M. A. Littlejohn, J. R. Hauser, and T. H. Glisson, “Monte Carlo Calculation of The Velocity-Field relationship for Gallium Nitride,” Appl. Phys. Lett., 26, 625, 1975.
- [4] B. Gelmont, K. Kim, and M. Shur, “Monte Carlo Simulation of Electron Transport in Gallium Nitride,” J. Appl. Phys., 74, 1818, 1993.
- [5] U. Bhapkar and M. S. Shur, “Monte Carlo Calculation of Velocity-Field Characteristics of Wurtzite GaN,” J. Appl. Phys., 82, 1649, 1997.
- [6] J. Kolník, İ. H. Oğuzman, K. F. Brennan, R. Wang, P. P. Ruden, and Y. Wang, “Electronic Transport Studies of Bulk Zincblende and Wurtzite Phases of GaN Based on an Ensemble Monte Carlo Calculation Including A Full Zone Band Structure,” J. Appl. Phys., 78, 1033, 1997.
- [7] M. Lundstrom, “Fundamentals of carrier transport second edition”, (University Press., Cambridge, 2000).
- [8] C. Jacoboni and L. Reggiani, “The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials”, Rev. Mod. Phys., 55, 645, 1983.
- [9] M. V. Fischetti and S. E. Laux, “Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space-charge effects”, Phys. Rev. B, 38, 9721, 1988.
- [10] J. Kolník, İ. H. Oğuzman, K. F. Brennan, R. Wang, and P. P. Ruden, “Monte Carlo calculation of electron initiated impact ionization in bulk zinc-blende and wurtzite GaN”, J. Appl. Phys. 81, 726 1997.
- [11] R. McClintock, J. L. Pau, K. Minder, C. Bayram, P. Kung, and M. Razeghi, “Hole-initiated multiplication in back-illuminated GaN avalanche photodiodes”, Appl. Phys. Lett. 90, 141112, 2007.

第4章 フルバンドデバイス解析

4-1 はじめに

この章では、窒化物半導体デバイスの電流-電圧特性、高周波特性あるいは耐圧特性などの計算を行うためのフルバンド構造に基づくデバイス解析の手法について記述する。ここでは、第3章で述べた電子輸送解析と同様に、電子の運動が古典力学で記述できるものと仮定する。実際に、今日実用化されている電子デバイスの動作原理は、電子の波動性と直接結びつくものではなく、そのため、電子を古典的粒子として考慮しても、実用上の不都合は生じない。デバイス内部の電子輸送の解析を行う場合、運動量空間だけでなく、実空間を考慮する必要がある。すなわち、デバイス内の電子分布やポテンシャル分布の計算が必要である。電子分布は、モンテカルロ法を用いてボルツマン輸送方程式を解くことにより決定することが可能である。また、ポテンシャル分布はポアソン方程式によって計算できる。ただし、電子の運動を計算する場合、ポテンシャル分布が利用され、一方、ポテンシャル分布の計算には、電子分布が適用される。つまり、デバイス解析では、ボルツマン輸送方程式とポアソン方程式の自己無撞着な計算が繰り返し行われる。次の4-2節では、自己無撞着計算や境界条件を示し、4-3節では、構築したデバイスシミュレータを用いて、窒化物半導体デバイスの電流利得遮断周波数および耐圧の向上について検討する。

4-2 フルバンドデバイス解析の手法

4-2-1 ボルツマン輸送方程式とポアソン方程式の自己無撞着計算

デバイス解析では、デバイス内の各電子の輸送と同時にデバイス内部のポテンシャル分布を計算する必要がある。上述したように、デバイス内の電子輸送は、モンテカルロ法を用いたボルツマン輸送方程式によって決定することができる。ただし、第3章の運動量空間における電子輸送とは異なり、デバイス内の位置情報が考慮され、そのため、実空間上の電子の運動の制限が加えられる。一方、デバイス内のポテンシャル分布は、次の2次元ポアソン方程式によって決定される。

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} = -\frac{\rho}{\epsilon} \quad (4-1)$$

ここで、 V はポテンシャル、 ρ は電荷密度、 ϵ は誘電率である。また、 x, y はそれぞれデバイ

スの長さ(横), 深さ(縦)方向の成分である。デバイスの奥行き方向の成分 z は、電子分布とポテンシャル分布がデバイスの奥行き方向に対して均一であると仮定することにより、無視することができる。また、式(4-1)の右辺の項 ρ には、デバイス内の任意の位置での電荷量が適用され、その電荷量は電子分布を用いて決定される。電子が運動すると、それに伴って電子分布は変化する。つまり、電子が運動を繰り返すたびに電子分布は変化するので、ポテンシャル分布は逐一更新される。一方、ポテンシャル分布の更新は、デバイス内の任意の位置での電界の変化を意味するので、電子の運動がその影響を受ける。このように、電子分布とポテンシャル分布は相互に関係し合う。そのため、デバイス解析では、デバイス内の電子分布とポテンシャル分布の自己無撞着な計算が繰り返し行われる。自己無撞着計算の手順は、(1) (導出した)ポテンシャル分布と第 3 章で記述したボルツマン輸送方程式を用いて、デバイス内の全ての電子の運動後の新たな電子状態とデバイス内の位置(これが電子分布に相当する)を決定し、(2) (決定された)電子分布から得られる電荷密度を式(4-1)に代入することにより、ポテンシャル分布を導出するという 2 つの操作を繰り返し交互に行うものである。ただし、それら電子分布とポテンシャル分布は、実空間上に考慮したメッシュ点に対して定義される。つまり、フルバンド構造に基づくデバイス解析の場合、第 3 章で述べたような運動量空間上に設定したメッシュ点(メッシュ点間隔 Δk)に加えて、デバイスの x 方向と y 方向に対してそれぞれ等間隔に区切ったときにできるメッシュ点(x と y 方向それぞれのメッシュ点間隔 $\Delta x, \Delta y$)が考慮される。ここで、電子はメッシュ点上にのみ存在するわけではないので、電子をメッシュ点上に分配した実効的な電子分布が必要である。実効的な電子分布は、Cloud in Cell(CIC)法によって決定することができる。CIC 法は、面積比を利用することにより電子を各メッシュ点に分配する方法であり、以下に示すような 2 つの手順によって構成される。

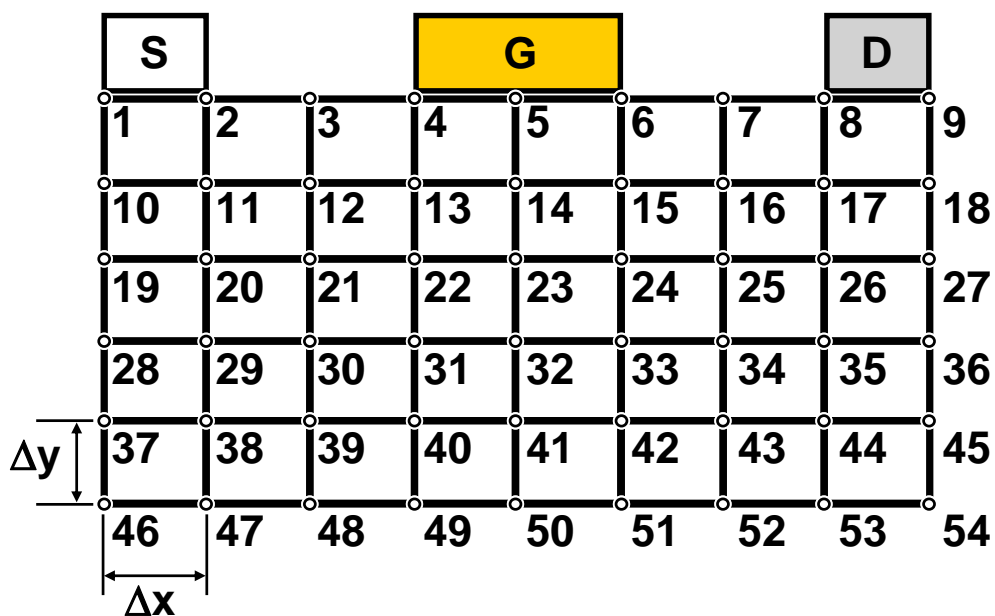
(i) 電子を囲む 4 個の隣接したメッシュ点を決定する。例として、図 4-1 に(a)デバイス構造の断面図と縦×横方向=8×5 で区切ったときのメッシュ点と、(b)電子の分配法を示す。いま、電子が 13, 14, 22, そして 23 番のメッシュ点で囲まれる微小面積内に存在する場合を考える(図 4-1 (b))。この微小面積は、

$$\Delta S = \Delta x \times \Delta y \quad (4-2)$$

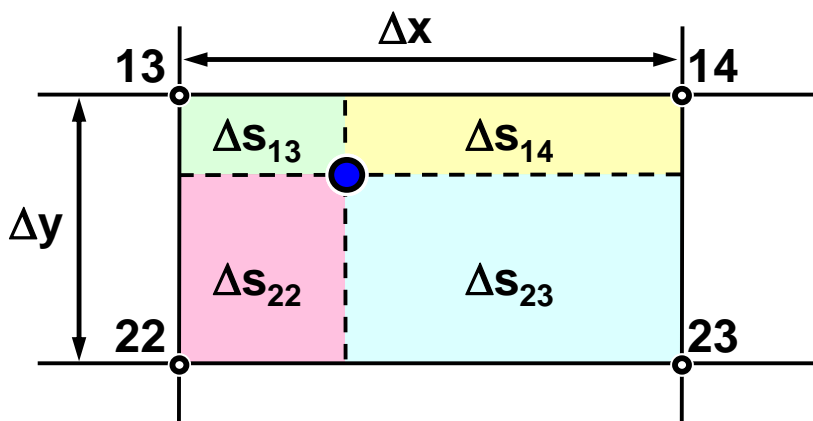
である。

(ii) 面積比に基づいて、電子を各メッシュ点に分配する。まず、図 4-1 (b)に示すように、 Δs_{13} , Δs_{14} , Δs_{22} , Δs_{23} を計算する。ここで、 Δs_{13} , Δs_{14} , Δs_{22} , Δs_{23} はそれぞれ、分配する電子を中心として微小面積 ΔS を 4 分割したときにできる面積である。例えば、13 番のメッシュ点に分配される粒子(電子)の数 ΔN_{13} は、(13 番のメッシュ点と電子に関して対称な方向にある)分割し

た微小面積 Δs_{23} を用いることにより、次式のように与えられる。



(a)



(b)

図 4-1 (a) デバイスの断面図とデバイスを縦×横方向=8×5 で区切ったときのメッシュ点と、(b)メッシュ点内の電子の分配法

$$\Delta N_{13} = \frac{\Delta s_{23}}{\Delta S} \cdot N_{\text{nor}} \quad (4-3)$$

ここで、 N_{nor} は(式(3-26)で示した)1 粒子あたりの電子数である。したがって、電荷量は

$$\Delta Q_{13} = q \Delta N_{13} = q \frac{\Delta s_{23}}{\Delta S} \cdot N_{\text{nor}} \quad (4-4)$$

となる。同様に、14, 22, 23 番のメッシュ点に電子を分配するには、それぞれ Δs_{22} , Δs_{14} , Δs_{13} を利用する。

以上のような CIC 法を用いてデバイス内の全ての電子をメッシュ点に分配することにより、実効的な電子分布を決定する。次に、自己無撞着計算の手順(2)として、各メッシュ点に対するポテンシャルを決定する必要がある。ポテンシャルの計算は、式(4-1)を次式のような離散化したポアソン方程式に置き換えることで行われる。

$$\frac{V_{x-1,y} - 2V_{x,y} + V_{x+1,y}}{\Delta x^2} + \frac{V_{x,y-1} - 2V_{x,y} + V_{x,y+1}}{\Delta y^2} = \frac{\rho_{x,y}}{\varepsilon} \quad (4-5)$$

ここで、 $V_{x,y}$ は離散化したポテンシャルである。また、添字 x,y はそれぞれ各メッシュ点に対応する x,y 方向の成分を指す。

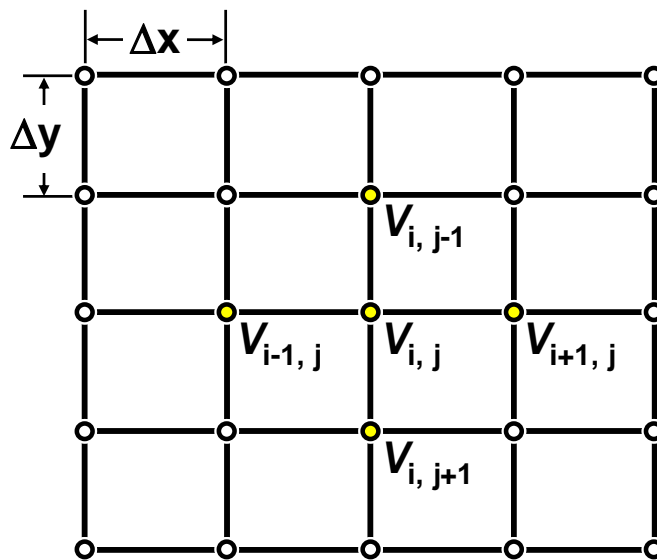


図 4-2 に差分化したポテンシャルと座標位置

式(4-5)の両辺に $-\Delta y^2$ を掛けてまとめると、次式ようになる。

$$-V_{x,y-1} - R^2 V_{x-1,y} + 2(R^2 + 1)V_{x,y} - R^2 V_{x+1,y} - V_{x,y+1} = \frac{\rho_{x,y}}{\epsilon} \Delta y^2 \quad (4-6)$$

ここで、 $R = \Delta y / \Delta x$ である。いま、デバイスの x, y 方向をそれぞれ、 NX, NY 等分した場合、 x 方向のメッシュ点数 MX は $MX = NX + 1$ 、 y 方向のメッシュ点数 MY は $MY = NY + 1$ であり、総メッシュ点数 N は $N = MX \times MY$ として与えられる。このとき、メッシュ点の座標 (x, y) を用いて2次元で表したポテンシャル $V_{x,y}$ と、メッシュ点番号を用いて1次元で表したポテンシャル $V(I)$ との関係は次式のようになる。

$$\begin{aligned} V_{x,y-1} &= V(I - MX), \quad x_{i-1,y} = V(I - 1), \quad V_{x,y} = V(I) \\ V_{x+1,y} &= V(I + 1), \quad x_{i,y+1} = V(I + MX), \end{aligned} \quad (4-7)$$

例えば、図4-1(a)の13番のメッシュ点の場合、式(4-6)で表される2次元ポアソン方程式は、

$$-V_{4,1} - R^2 V_{3,2} + 2(R^2 + 1)V_{4,2} - R^2 V_{5,2} - V_{4,3} = \frac{\rho_{4,2}}{\epsilon} \Delta y^2 \quad (4-8)$$

となる。式(4-7)を適用して、式(4-8)のポアソン方程式を1次元化すると、

$$-V(4) - R^2 V(12) + 2(R^2 + 1)V(13) - R^2 V(14) - V(22) = B(13) \quad (4-9)$$

となる。ここで、1次元で表したポアソン方程式の左辺の各ポテンシャル項の係数をそれぞれ次のように置く。

$$\begin{aligned} AN(I) \cdot V(I - MX) &+ AW(I) \cdot V(I - 1) + AC(I) \cdot V(I) \\ + AE(I) \cdot V(I + 1) &+ AS(I) \cdot V(I + MX) = B(I) \quad (I = 1, 2, 3, \dots, N) \end{aligned} \quad (4-10)$$

式(4-10)において、 I がデバイスの自由表面あるいは電極部分に相当するメッシュ点の場合、デバイスの自由表面と電極の境界条件として、それぞれ Neumann 条件と Dirichlet 条件を適用する[1]。自由表面(“例、図4-1(a)で示した3, 7, 10, 18, 19, \dots , 45, 47~53番のメッシュ点”)の場合、自由表面に相当するメッシュ点の係数 AC とデバイス内部に相当するメッシュ点の係数以外の係数を0とする。特に、自由表面の端のメッシュ点(図4-1(a)中、45と54番のメッシュ点)では、 AC 以外の係数を0とする。また、電極部分(図4-1(a)中、1, 2, 4, 5, 6, 8, 9番のメッシュ点)の場合、 AC 以外の係数を0とする。ここで、表4-1に、図4-1(a)で示した

メッシュ番号を例に挙げ、デバイス内部, 自由表面, そして、電極部分の係数の一部をまとめる。電極部分では、電極のポテンシャル V が印加バイアス(V_g)に等しいことを考慮して、 AC の係数を 1 に設定する。

表 4-1 自由表面と金属-半導体界面の係数例

	デバイス内部 I=11	自由表面 I=3 I=10		自由表面端 I=46	(ゲート)電極 I=5
$AN(I)$	-1	0	0	0	0
$AW(I)$	$-R^2$	0	0	0	0
$AC(I)$	$2(R^2+1)$	$2(R^2+1)$	$2(R^2+1)$	$2(R^2+1)$	1
$AE(I)$	$-R^2$	0	$-R^2$	0	0
$AS(I)$	-1	-1	0	0	0

式(4-10)を行列式で表すと、

$$A \cdot V = B \tag{4-11}$$

ただし、

$$A = \begin{pmatrix} AC & AE & 0 & \cdots & 0 & AS & 0 & \cdots & 0 \\ AW & & & & & & & & \\ 0 & & & & & & & & \\ \vdots & & & & & & & & \\ 0 & & & & & & & & \\ AN & & & & & & & & \\ 0 & & & & & & & & \\ \vdots & & & & & & & & \\ 0 & \cdots & 0 & AN & 0 & \cdots & 0 & AW & AC \end{pmatrix} \tag{4-12}$$

である。ここで、係数行列 A の特徴は、式(4-12)から分かるように、行列成分の大部分がゼロということである。このような行列要素の計算手法として、不完全コレスキー分解 (Incomplete Cholesky-Conjugate Gradient Algorithm: ICCG)法、あるいは不完全 LU 分解 (Incomplete LU Bi-Conjugate Algorithm: ILUBCG)法などの反復法が利用される[2]。行列 A が対称行列の場合、収束の速い ICCG 法が適している。しかし、一部に非対称要素を含む行列に ICCG 法を適用する場合、行列を対称行列へ変換しなければならない。デバイス解析では、複雑なデバイス構造を考慮する場合もあるため、非対称行列を扱うことになる。そのため、本論文では、非対称行列に対して、式の変換をすることなく解を得ることができる ILUBCG 法を用いた。ただし、ILUBCG 法は、ICCG 法に比べて、反復法の収束が遅いので、計算時間が長くなるという欠点がある。以上のように、デバイス解析では、電子分布とポテンシャル分布の更新を交互に行う。

4-2-2 境界条件

4-2-1 節までの説明で、デバイス解析に必要なボルツマン輸送方程式に基づく電子の輸送と電子分布、そして、ポアソン方程式に基づくデバイス内のポテンシャル分布の計算方法について述べた。この節では、デバイス内部の電子輸送に関する境界条件について述べる。

電子輸送に関する基本的な境界条件は次の 2 つである。1 つ目がデバイス自由表面に電子が到達した場合であり、2 つ目は電子が電極に到達した場合である。これらに加えて、AlGaIn/GaN HEMT などの異種半導体を接合させたヘテロ構造を計算する場合には、ヘテロ界面での境界条件も考慮する必要がある。図 4-3 にデバイス内の電子輸送についての境界条件を模式的に示す。

(1) デバイスの自由表面に対する境界条件

デバイスの自由表面で想定される電子の運動について、境界条件がある場合とない場合を図 4-3 に示した。電子 e_1 が、自由走行時間 Δt の間にデバイスの自由表面に到達する場合、境界条件を与えなければ、電子はその表面を通過する。すなわち、半導体を突き抜けた e_1' の位置まで移動してしまう。そこで、自由表面に到達した電子が自由表面で反射する過程を境界条件として考慮する必要がある。デバイスの自由表面に対する境界条件は、図 4-3 のように自由表面に到達した電子の位置ベクトルと波数ベクトルを e_1' の位置へ置き換えるものとして設定する。このとき、 $e_1(e_1')$ の波数ベクトル $\mathbf{k}(\mathbf{k}')$ と位置 $\mathbf{r}(\mathbf{r}')$ をそれぞれ次式のように表す。ここで、バンド指数は変化しないものとする。

$$\begin{aligned} r_1 &= (x, y), \quad k_1 = (k_x, k_y, k_z) && : \text{電子} e_1 \\ r_1'' &= (x'', y''), \quad k_1'' = (k_x'', k_y'', k_z'') && : \text{電子} e_1'' \end{aligned} \quad (4-24)$$

e_1 と e_1'' の関係は、次式のように表すことができる。

$$\begin{aligned} x'' &= x, \quad y'' = y_{\max} - (y - y_{\max}) \\ k_x'' &= k_x, \quad k_y'' = -k_y, \quad k_z'' = k_z \end{aligned} \quad (4-25)$$

ここで、 y_{\max} はデバイスの厚さである。このように、自由表面では、電子のデバイス内への反射を考慮し、その反射に対応した波数ベクトルと位置ベクトルに更新する操作を境界条件として適用する。

(2) 電極に対する境界条件

まず、ショットキー接合であるゲート電極(図 4-3 では、G)の境界条件について述べる。デバイス内を走行する電子 e_2 が、ゲート電極に到達した場合、その電子はゲート電流として、ゲート電極に吸収される(e_2')。そのため、デバイス内の電子の数は 1 つ減少する。

一方、オーミック性のソースあるいはドレイン電極(図 4-3 では、S と D)の境界条件では、電子の出入りを調整・制御するために中性領域を考慮する。ここで、中性領域とは、電子数を一定に保つように調整が行われる領域であり、図 4-3 に示すように、オーミック電極横に設定する(図 4-3 では、斜線の領域)。ソース電極については、全ての電子が自由走行をした後に中性領域内の電子の数が少なければ新たに電子を中性領域内に注入し、電子数が多ければソース電極に電子を吸収させる。一方、ドレイン電極では、電子数が少なければドレイン電極に到達した電子を中性領域に戻し、電子数が多ければドレイン電極に電子を吸収させる。このように、電極に対する境界条件には、電子の注入あるいは吸収の操作が考慮される。ここで、電子を注入する場合、注入される電子の電子状態は熱平衡状態のフェルミ-ディラック分布に則って決定する。

(3) ヘテロ界面に対する境界条件

図 4-4 に AlGaIn/GaN HEMT の模式的なバンド図を示す。ここで、 Φ_B は障壁高さ、 ΔE_c は伝導帯不連続量である。ヘテロ界面では、電子のエネルギーと伝導帯不連続量を比較する。いま、自由走行時間 Δt の間に、電子 e_3 が、バンドギャップの低い半導体(GaN)からバンドギャップの高い半導体(AlGaIn)へ向かってヘテロ界面を通過する場合、通過前の電子のエネルギー(E_3)によって場合分けを行う必要がある。すなわち、ヘテロ界面で電子 e_3 が反射されるか、あるいは、透過するかを判別する。

(3-1) $E_3 < \Delta E_c$ の場合

ΔE_c 以下の電子エネルギー E_3 を有する電子 e_3 が GaN 層から AlGaIn 層方向へ進むとき、 ΔE_c のエネルギー障壁によって、その電子は GaN 層側へ反射される。この反射に対応した電子状態と位置ベクトルを決定するため、自由走行時間 Δt を GaN 層内滞在時間 Δt_1 と AlGaIn 層内滞在時間 Δt_2 に分け、図 4-4 のように、 Δt_2 間の移動距離に相当する GaN 層の位置 e_{3ref} に電子 e_3 を戻す。

(3-2) $E_3 > \Delta E_c$ の場合

電子 e_3 はエネルギー障壁を越えることが可能であるので、位置ベクトルは変化しない。しかし、通過後の電子のエネルギー基準が GaN から AlGaIn に代わるので、それに伴い、電子状態を更新する。つまり、通過後の電子のエネルギー $E_3' (= E_3 - \Delta E_c)$ として、エネルギーを更新した後、そのエネルギーに対応する電子状態を一様乱数によって決定する。ただし、 E_3' に対応する電子状態が存在しない場合、(3-1) の操作と同様に、 Δt_2 間の移動距離に相当する GaN 層の位置 e_{3ref} に電子 e_3 を戻す必要がある。

以上のように、電子輸送についての境界条件を与えることで、デバイス解析を行うことができる。

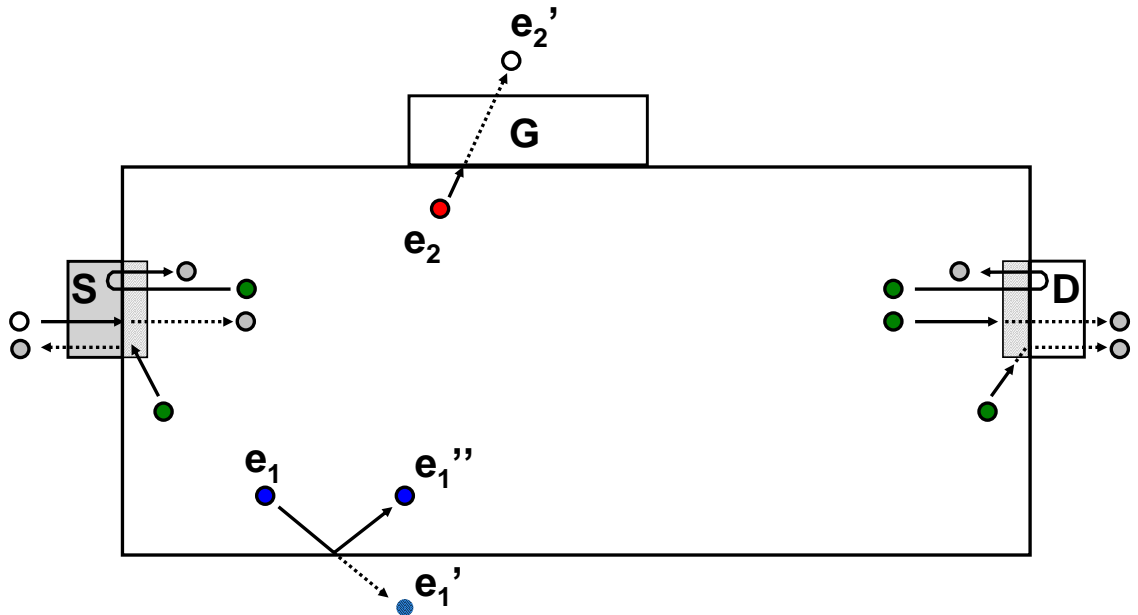


図 4-3 デバイス界面の電子の運動

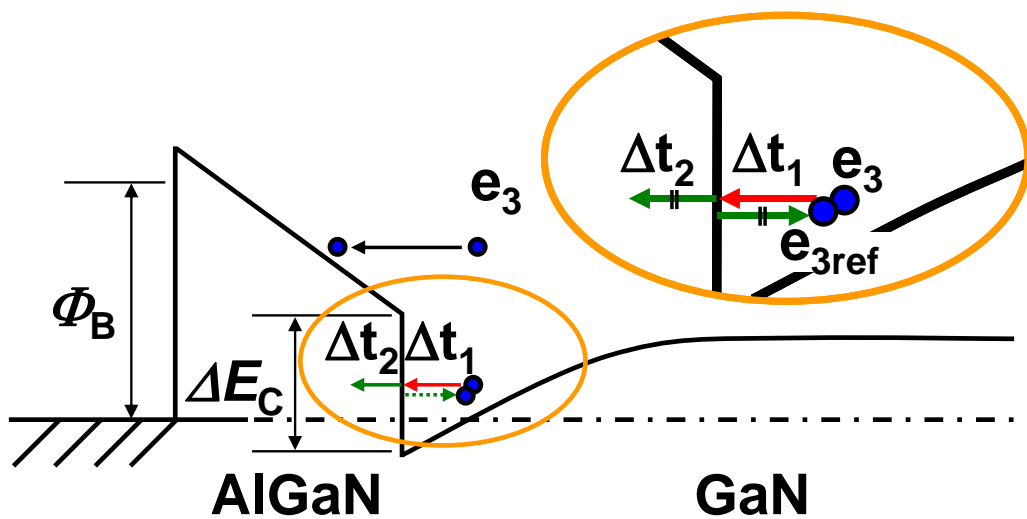


図 4-4 AlGaIn/GaN HEMT のバンド構造の模式図

4-2-3 デバイス解析プログラム

実際のプログラムの流れとして、図 4-5 にデバイス解析のフローチャートを示す。

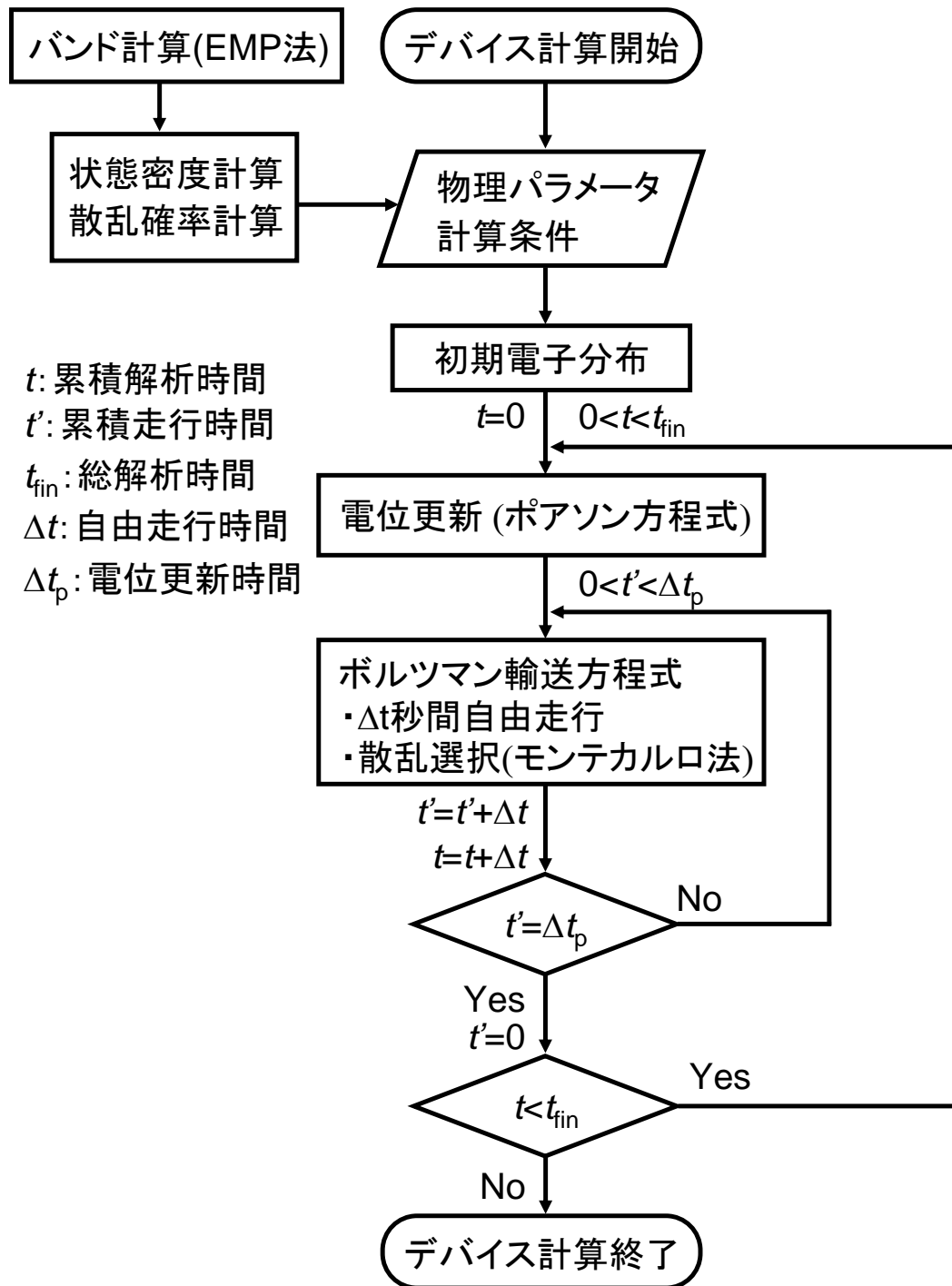


図 4-5 デバイス解析プログラムのフローチャート

(i) ここでは、電子輸送解析と同様の入力処理を行う。すなわち、バンド計算によって作成したデータ表(エネルギーバンド構造、状態密度、散乱確率、そして、 $\partial E/\partial \mathbf{k}$ など)と材料パラメータを読み込む。ここで、材料パラメータとは、格子定数、比誘電率、フォノンエネルギーなどの物性値を指す。また、デバイスの印加バイアス、メッシュ数、格子温度、キャリア濃度や自由走行時間、粒子数などの計算条件を入力する。

(ii) 入力した粒子数について、運動量空間と実空間それぞれの初期分布を決定する。まず、運動量空間における初期分布($t=0$)の決定は、電子輸送解析の場合と同様の方法で決定する。すなわち、熱平衡状態を仮定し、フェルミ-ディラック分布関数と一様乱数を用いて、電子エネルギーを決定する。その後、決定したエネルギーに対応する全ての電子状態の中から、バンド指数(i_c)と波数ベクトル(\mathbf{k})を、新たな一様乱数を用いて選択する。また、実空間の初期分布については、一様乱数を用いて、チャンネル層領域に電子を分布させる。ヘテロ構造を考慮する場合の実空間の初期分布については、ヘテロ界面のチャンネル層側に対して、ヘテロ界面から数ナノメートルの厚さの領域内に分布させる。(本論文では、2 nm とした。)

(iii) (更新した)電子分布と CIC 法を用いて、実効電子分布を求め、式(4-6)を解くことによりポテンシャル分布を決定する。

(iv) 電子輸送解析と同様に、おのこの電子状態にしたがって運動量空間上のドリフト輸送を計算し、また、実空間上の電子走行を計算する。電子走行後の電子状態の更新後、4-2-2節で述べた境界条件と比較し、電子状態の再更新をするか否かを判定する。再更新が必要な場合は、それに応じた処理を行う。

(v) デバイス解析では、自由走行時間に加え、電位更新時間を考慮している。電位更新時間は、自由走行時間の整数倍高い値に設定する。もし、両者の時間設定が同じ場合、次の処理へ移る。一方、電位更新時間が自由走行時間の整数倍高い値に設定した場合、累積走行時間が電位更新時間に等しいかどうかを判定する。累積走行時間と電位更新時間が等しい場合、累積走行時間をゼロに戻し、次の処理へ移る。累積走行時間の値が電位更新時間のものより小さい場合、累積走行時間に自由走行時間を加算した後、(iv)の処理へ戻す。(本論文では、自由走行時間を十分に小さく設定しているため、電位更新時間は自由走行時間より 5 倍高い値に設定している。)

(vi) 累積解析時間に電位更新時間を加算する。

(vii) 累積解析時間が(i)で設定した総解析時間に達しているかどうかの判定をし、達した場合は計算終了、未到達の場合は(iii)の操作に戻る。

4-3 フルバンドデバイス解析結果

4-3-1 基本解析

図 4-6 に計算に用いた AlGaIn/GaN HEMT の断面構造を示す。障壁層には、Al 組成が 0.25、厚さが 25 nm のアンドープ層 AlGaIn を仮定した。チャネル層には、250 nm の厚さ のアンドープ GaN を考慮した。ソース-ゲート間距離(Lsg), ゲート長(Lg)、ゲート-ドレイン間距離(Lgd)はそれぞれ、1 μm とした。自発分極およびピエゾ分極によって生じる分極電荷は $1.1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ を仮定した[3]。また、分極電荷は、Karmalkar の計算のように AlGaIn/GaN 界面に正電荷のみを考慮し[4]、AlGaIn/GaN 界面の AlGaIn 層 2 nm に $5.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ の正電荷として扱った。考慮した粒子数は 20000 個、メッシュサイズは $(\Delta x, \Delta y) = (1, 1 \text{ nm})$ である。また、考慮した散乱機構は有極性光学フォノン散乱、無極性光学フォノン散乱、音響フォノン散乱、圧電ポテンシャル散乱である。

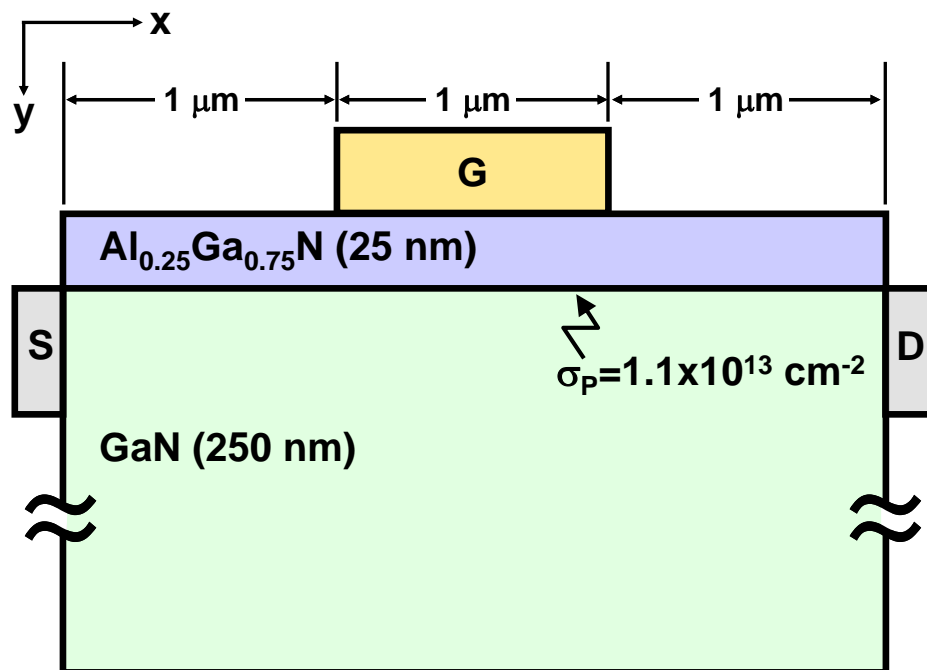


図 4-6 計算に用いた AlGaIn/GaN HEMT の断面図

図 4-7 に計算で得られた各電極に流入/流出する電荷量の時間依存性を示す。電荷量は、4-2-2 節の境界条件で説明したように、各電極に対する電子の出入りを累積した結果である。この電荷量を時間で微分することにより、電流を導出できる。

$$I_D = \frac{dQ}{dt} \quad (4-26)$$

ただし、式(4-26)で直流電流 I_D を定義する場合、電荷量の時間依存性が一定の変化量となった領域(定常状態)でなければならない。図 4-6 のデバイス構造と計算条件の場合、計算時間が 25ps に達したとき、電荷量の時間依存性が一定の変化量を示した。

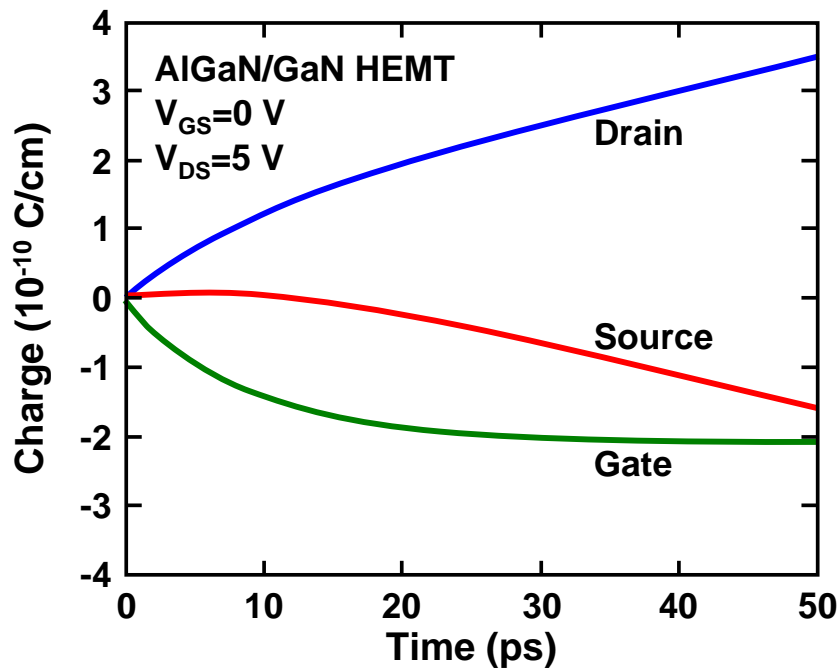
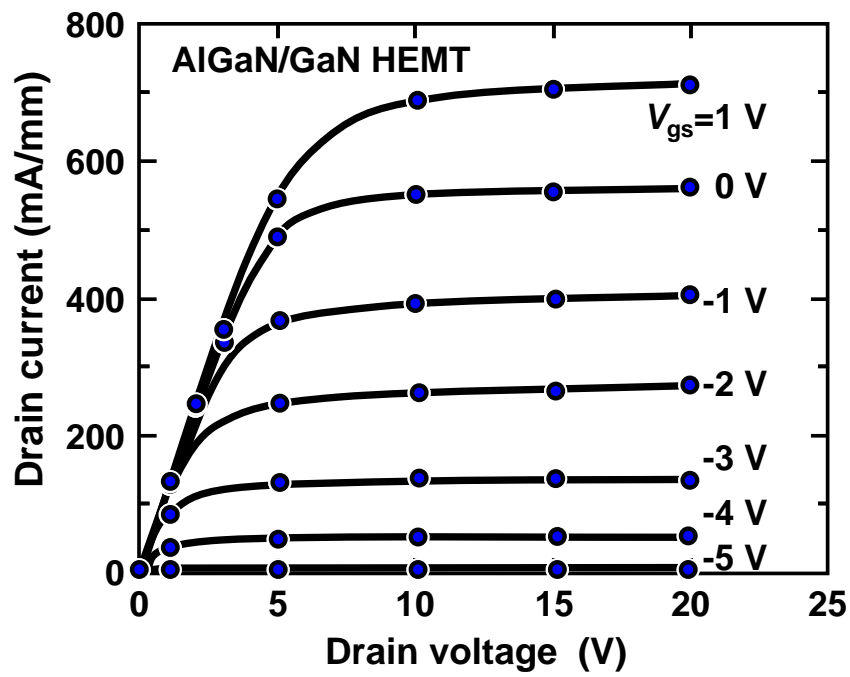


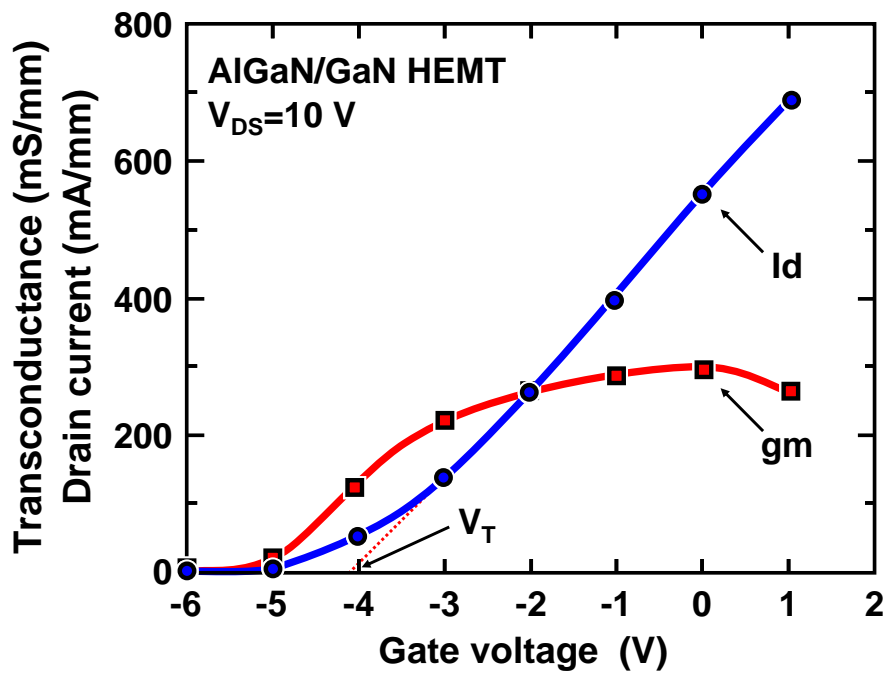
図 4-7 各電極における電荷量の時間依存性

図 4-8 に(a)ドレイン電流-ドレイン電圧(I - V)特性と(b)ドレイン電圧(V_{DS})が 10 V の場合の伝達特性を示す。電流-電圧特性は、図 4-7 で示したような計算を、各バイアス条件下で行うことにより得ることができる。計算の結果、ゲート-ソース電圧(V_{GS})が 1 V のとき、最大ドレイン電流は 0.7 A/mm であった。 $V_{DS}=10$ V における最大相互コンダクタンスは、 $V_{GS}=0$ V で 0.25 S/mm であった。また、伝達特性の結果から、線形外挿によって求めた閾値は-4 V であった。

図 4-9 に $V_{GS}=0$ V, $V_{DS}=10$ V のときの(a) ポテンシャル分布および(b) 電子分布を示す。また、図 4-10 に $V_{GS}=-5$ V, $V_{DS}=10$ V のときの(a) ポテンシャル分布および(b) 電子分布を示す。ここで、ポテンシャル線間隔は 1 V である。図 4-9 (a), 4-10 (a)のポテンシャル分布に示されるように、ゲート電圧に関わらず、電界はドレイン側のゲート電極端に集中する。しかし、ゲート電圧が-5 V の場合のゲート電極端の電界集中は、 $V_{GS}=0$ V の場合に比べて、より高いことが分かる。図 4-9, 4-10 (b)の電子分布から、ほとんどの電子が AlGaIn/GaN 界面の GaN 層側に分布することが分かる。 $V_{GS}=0$ V の場合、電子分布はドレイン側のゲート電極下付近を除いて密である。ドレイン側のゲート電極端で、電子分布が疎となるのは、電界集中のためである。高電界下では、電子速度が増加する。電子速度が増加した分、電流連続を満たすために、電子分布は減少する。一方、ゲート電圧に-5 を印加した場合、ゲート電極下では、電子分布は一様に疎となり、電流がゼロとなる(図 4-8)。

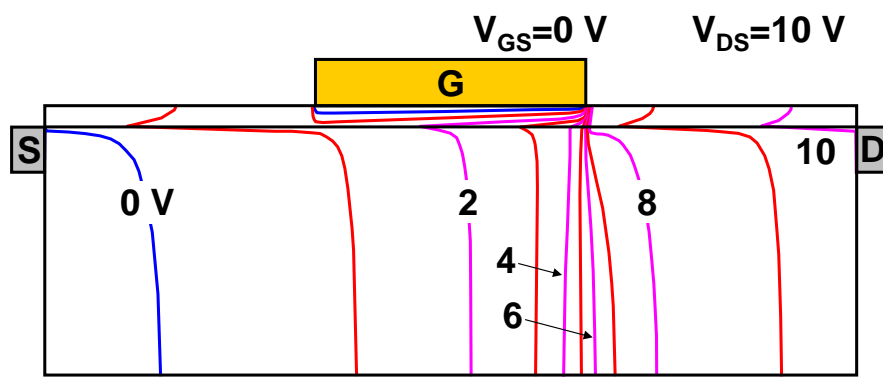


(a)

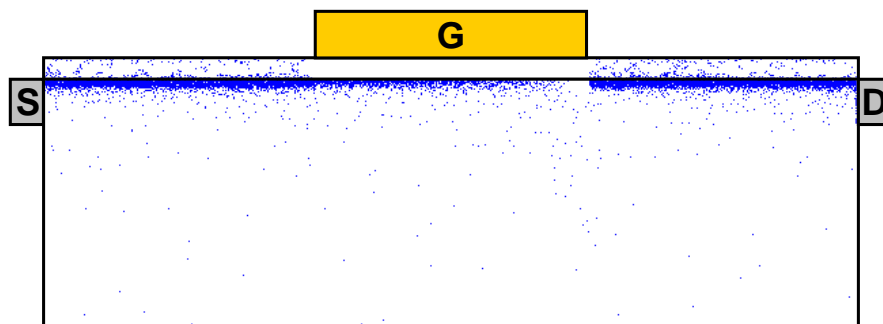


(b)

図 4-8 計算した (a) I-V 特性と(b)伝達特性

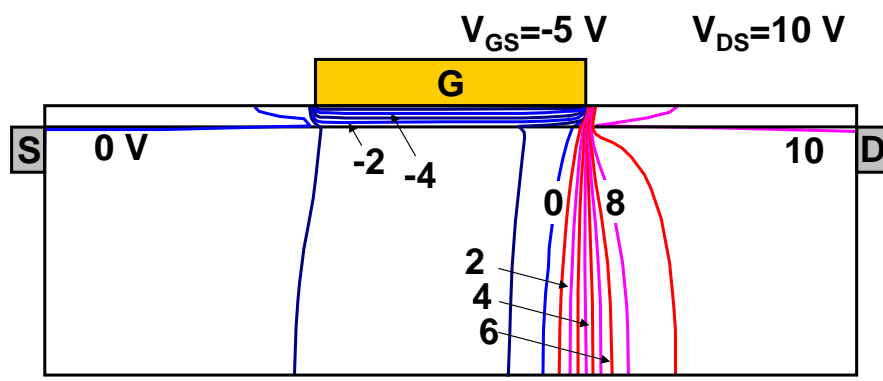


(a)

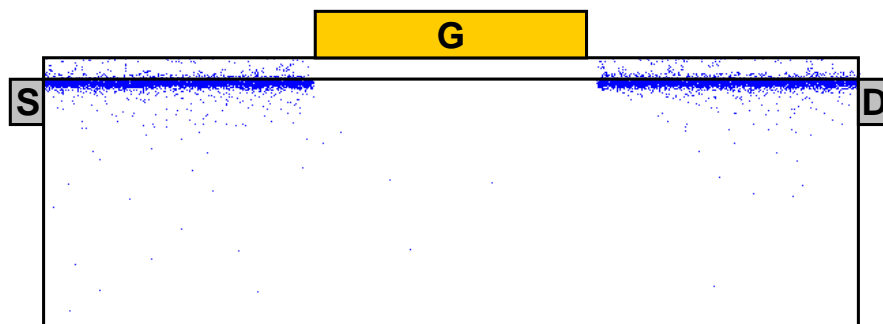


(b)

図 4-9 $V_{GS} = -5 \text{ V}$, $V_{DS} = 10 \text{ V}$ のときの(a) ポテンシャル分布及び(b) 電子分布



(a)



(b)

図 4-10 $V_{GS} = -5 \text{ V}$, $V_{DS} = 10 \text{ V}$ のときの(a) ポテンシャル分布及び(b) 電子分布

4-3-2 高周波解析

第3章の速度-電界特性の計算結果で示したように、窒化物半導体は高電界下で高い電子速度を有することから、高周波デバイスとして期待されている。窒化物半導体の高周波デバイスは主に、チャンネル層にGaNを用いたHEMT構造で研究が進められてきた。Higashiwakiらは60 nmのゲート電極と4 nmの薄い障壁層を形成することにより、AlGaIn/GaN HEMTにおいて190 GHzの電流利得遮断周波数(f_T)を達成した[5]。Sunらは55 nmのゲート電極とAlGaIn障壁層の代わりに10 nmのAlInN層を採用し、205 GHzの f_T を実現した[6]。Leeらはゲート長30 nmのAlInN/GaN HEMTにInGaIn後方障壁層を取り入れることにより、 f_T が300 Hzに達することを示した[7]。Shinoharaらは20 nmの極短ゲート長と2 nmの薄いAlN障壁層、低Al組成の $\text{Al}_{0.08}\text{Ga}_{0.92}\text{N}$ 後方障壁層、さらには100 nmのソース-ドレイン電極間距離を用いることにより、454 GHzの f_T を達成した[8]。このように、 L_g 短縮を軸とした f_T の向上が継続的に実現されてきたため、GaNチャンネルHEMTのテラヘルツ動作への期待が高まっている。しかし、 L_g の短縮は既に20 nmにまで達しており、 L_g 短縮による f_T の一層の向上は困難になり始めている。そこで、窒化物半導体デバイスの f_T を向上させる新たなアプローチとして、GaNの代わりにInGaInをチャンネル材料に用いる方法を第1章で提案した。この節では、InGaInチャンネルHEMTの f_T の計算結果をGaNチャンネルHEMTのものと比較することにより、InGaInチャンネルHEMTのテラヘルツ動作の可能性について議論する。また、これまでの f_T に関する実験報告に注目すると、 f_T の向上を目的としたデバイススケールリング技術では、 L_g の短縮に伴って、 L_{sg} と L_{gd} も同時に短縮されていることが分かる[8]。しかしながら、 L_{gd} が f_T に及ぼす影響については、現在のところ議論されておらず、また、理論解析による報告も行われていない。そこで、この節では、ゲート-ドレイン間距離の短縮による f_T の向上とその機構についても記述する。

(i) InGaInチャンネルHEMTの電流利得遮断周波数の計算

図4-11に、計算に用いたデバイス構造の断面図を示す。エピ結晶の構造は、Al組成0.78のアンダーープAlInN障壁層(10 nm)、アンダーープInGaInチャンネル層(10 nm)、とAl組成0.78のアンダーープAlInN後層障壁層(150 nm)である。ここで、InGaInチャンネル層のIn組成は0~1の範囲で変化させた。解析では、 m 面上に結晶成長した無極性半導体を仮定し、分極電荷の影響を無視した。また、格子定数差によって生じるピエゾ分極も無視した。界面に電荷を生じさせるために、上下のAlInN障壁層に密度 $3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ (2 nm)のドナーを仮定し、障壁層とチャンネル層の界面に厚さ1 nmのアンダーープスペーサ層を設けた。デバイス寸法は $L_{sg}=0.1 \mu\text{m}$ 、 $L_g=10\sim 200 \text{ nm}$ 、 $L_{sd}=0.3 \mu\text{m}$ とした。また、20000個の初期粒子数、自由走行時間0.1fs、ポテンシャル更新時間0.5fs、および、メッシュ間隔として、 $\Delta x=1 \text{ nm}$ 、 $\Delta y=1 \text{ nm}$ を用いた。考慮した散乱機構は有極性光学フォノン散乱、無極性光学フォノン散乱、音響フォノン散乱、イオン化不純物散乱である。

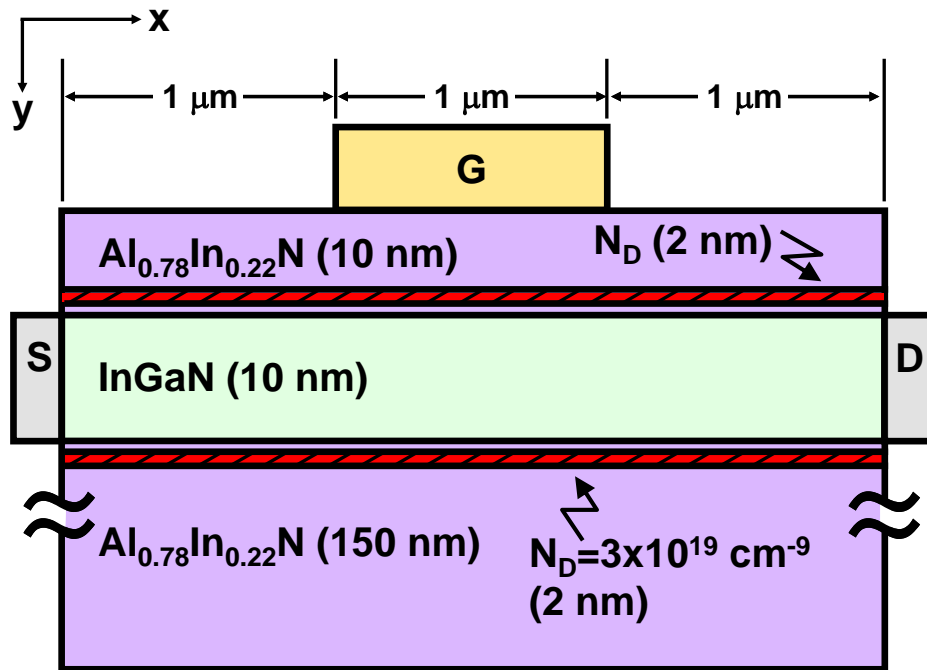


図 4-11 計算に用いた AlInN/InGaN HEMT の断面図

図 4-12 に $L_g=200\text{ nm}$ の AlInN/InN HEMT の I-V 特性を示す。最大ドレイン電流は 5.7 A/mm 、最大相互コンダクタンスは 2.7 S/mm 、飽和ドレイン電圧は約 3 V であった。また、伝達特性から線形外挿して求めたしきい値電圧は約 -3 V であった。In 組成 0.5 の $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ と GaN をチャンネルに用いたデバイスについても計算した結果、同じデバイス寸法で $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$, GaN チャンネル HEMT において、最大ドレイン電流がそれぞれ、 $3.3, 1.9\text{ A/mm}$ 、最大相互コンダクタンスがそれぞれ、 $1.6, 0.9\text{ S/mm}$ 、しきい値電圧がそれぞれ、 $-2.5, -2\text{ V}$ であった。これらの結果から、InGaN チャンネル層の In 組成を高くすることにより、最大ドレイン電流と最大相互コンダクタンスが増加することが分かった。ここで、ドーピング濃度は固定しているので、この電流の増加は、チャンネルの In 組成を高くすることによるチャンネル内の電子速度の増加のためであると考えられる。

図 4-13 に InN, $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$, GaN チャンネル HEMT のチャンネル電子速度分布を示す。ここで、横軸はドレイン側のゲート電極端を基準として示した。この計算結果から、InGaN チャンネル層の In 組成が増加すると、チャンネル電子のドリフト速度が増加することが分かる。InN チャンネルの場合、ピーク電子速度は $4.6 \times 10^7\text{ cm/s}$ であり、第 3 章で示した定常状態のピーク電子速度に比べてわずかに高い。これは、ドレイン側のゲート電極端での発生する電界集中によって速度オーバーシュートが起こるためである。また、高 In 組成のチャンネル HEMT は高いピーク電子速度を示すだけでなく、ソース-ドレイン間全体の電子速度が $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$,

GaN チャンネル HEMT よりも高いため、ソース、ドレイン抵抗が低くなる。その結果、高いドレイン電流と高い相互コンダクタンスが得られた。

図 4-14 に $L_g=10\text{ nm}$ の AlInN/InN HEMT の I-V 特性を示す。最大ドレイン電流は 12.5 A/mm 、最大相互コンダクタンスは 1.8 S/mm であった。また、しきい値電圧は約 -14.5 V であった。In 組成 0.5 の $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$, GaN チャンネル HEMT について同様の計算を行った結果、同デバイス寸法で、最大ドレイン電流はそれぞれ $7.1, 3.7\text{ A/mm}$ 、最大相互コンダクタンスはそれぞれ、 $0.9, 0.5\text{ S/mm}$ 、しきい値電圧はそれぞれ、 $-12, -8\text{ V}$ であった。 $L_g=200\text{ nm}$ のデバイスの結果と比較すると、 $L_g=10\text{ nm}$ では、しきい値電圧が負方向にシフトし、相互コンダクタンスが低下した。これらの劣化は、ゲート電極の短縮にともなって生じる短チャンネル効果 (short channel effect) のためである [9, 10]。

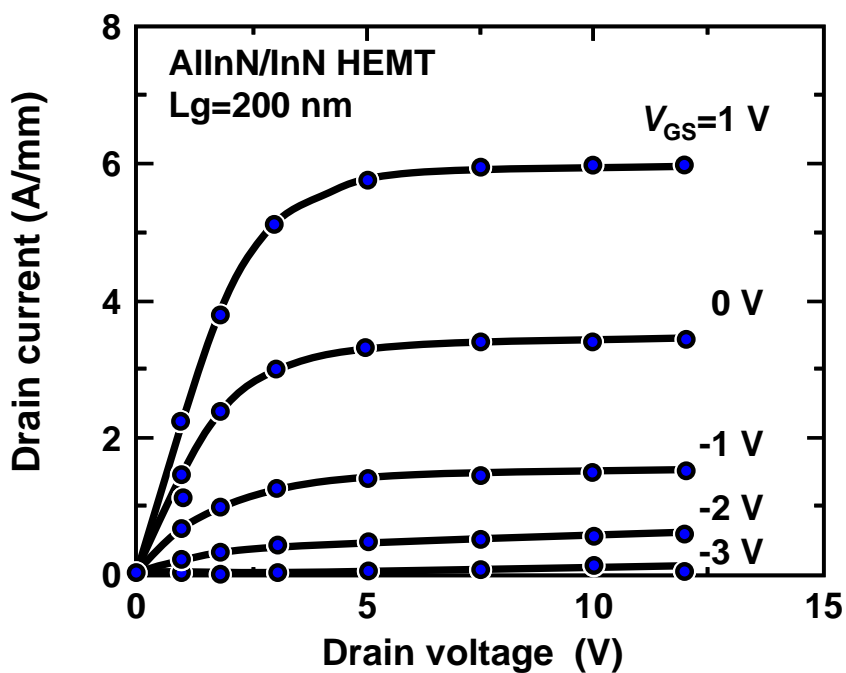


図 4-12 $L_g=200\text{ nm}$ の AlInN/InN HEMT の I-V 特性

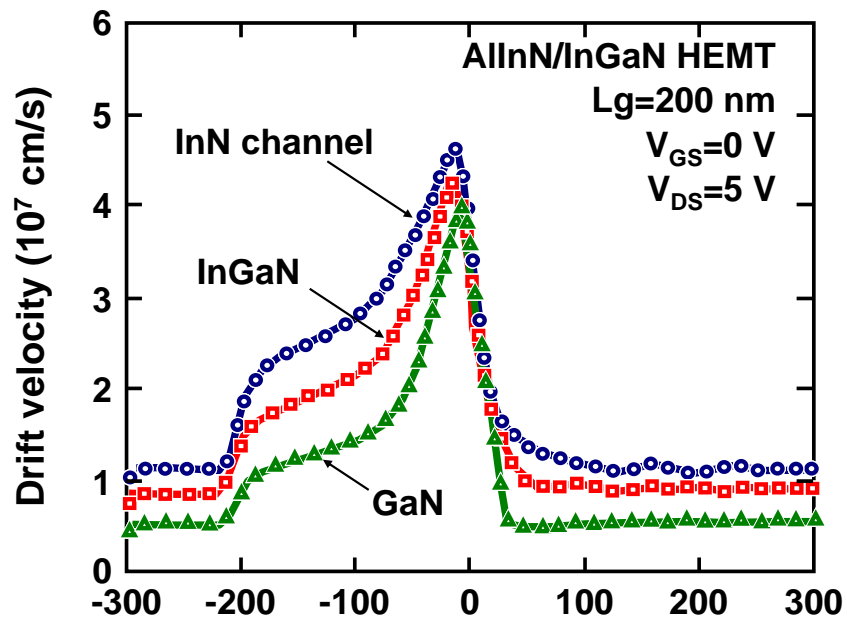


図 4-13 $L_g=200$ nm の InN, $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$, GaN HEMT の
チャネル電子速度分布

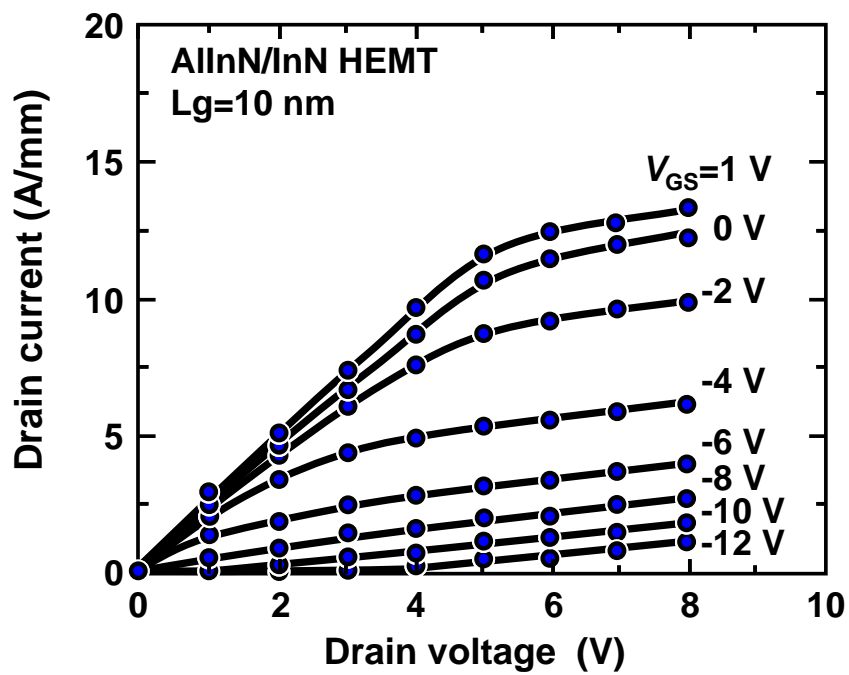


図 4-14 $L_g=10$ nm の AllInN/InN HEMT の I-V 特性

図 4-15 にしきい値電圧の L_g 依存性を示す。 $L_g \geq 100 \text{ nm}$ では、しきい値電圧は L_g にほとんど依存しない。このとき、ゲート長に対するチャネル長(チャネル層とゲート電極間の距離)の比(アスペクト比)は 10 以上の高い値である。一方、 $L_g \leq 50 \text{ nm}$ では、 L_g の短縮に依存して、しきい値電圧が負方向にシフトする。このとき、アスペクト比は 5 以下となる。ゲート電極を短くすればするほど、ゲート電圧によるゲート電極下のチャネル電子の制御の効果が弱くなり、そのため、しきい値電圧が負方向にシフトした。

図 4-16 に相互コンダクタンスの L_g 依存性を示す。 $L_g \geq 100 \text{ nm}$ では、 L_g の短縮に伴って、相互コンダクタンスは増加する。これは、図 4-15 で確認したように、 $L_g \geq 100 \text{ nm}$ の場合、ゲート電圧によるチャネル電子の制御が十分になされており、かつ、 L_g を短縮することにより、チャネル抵抗が低減するためである。このとき、チャネルの In 組成が高いほど、相互コンダクタンスの増加率は高い。一方、 $L_g < 50 \text{ nm}$ では、 L_g を短くすることにより、全てのデバイスで相互コンダクタンスの減少が示された。しかし、InN チャネル HEMT の場合、 L_g を 200 nm から 10 nm に短縮したときの相互コンダクタンスの劣化率は 30%を示し、 $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ (37%), GaN チャネル HEMT(45%)に比べて、相互コンダクタンスの劣化が抑えられることが分かった。

短チャネル効果による電子速度の増加を確認するために、図 4-17 に $L_g=10, 50, 200 \text{ nm}$ の InN チャネル HEMT の速度分布を示す。 L_g の短縮に伴って、電子速度が増加することが分かる。特に、ゲート長 10nm のときのピーク電子速度は、定常状態のピーク速度を 1.8 倍高い $6.4 \times 10^7 \text{ cm/s}$ を示し、速度オーバーシュート効果がより顕著に確認された。

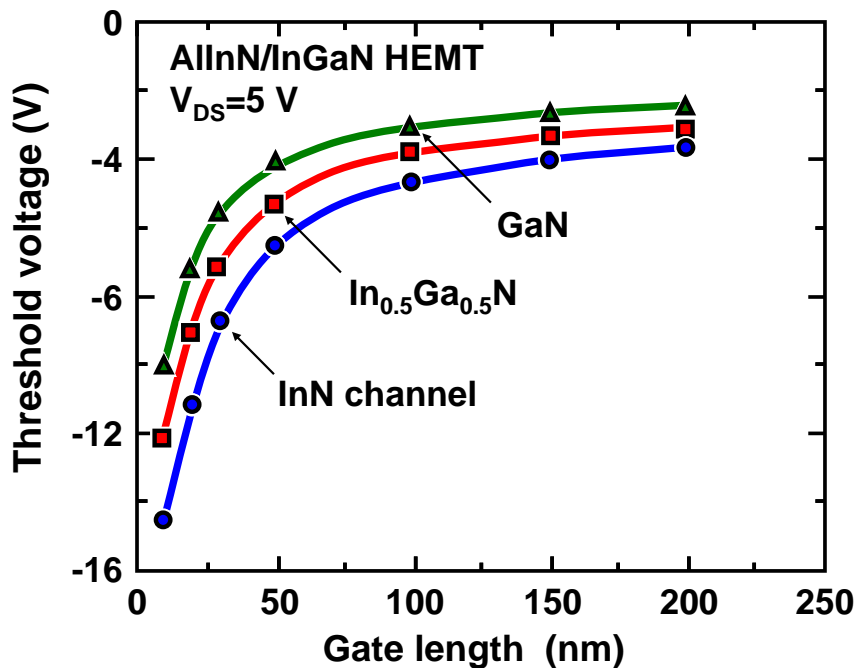


図 4-15 しきい値電圧のゲート長依存性

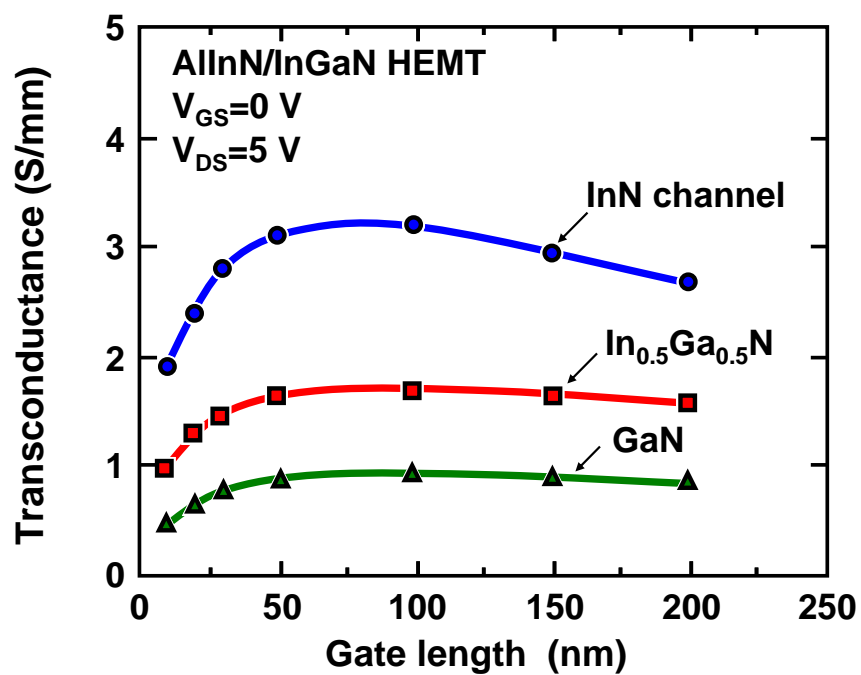


図 4-16 最大相互コンダクタンスのゲート長依存性

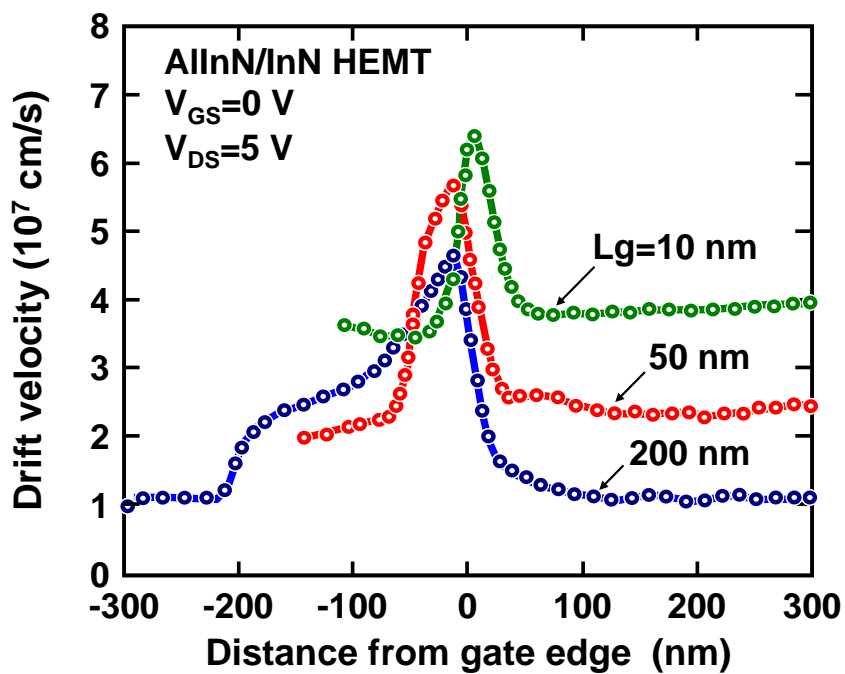


図 4-17 $L_g=10$ nm の InN チャネル HEMT の
チャネル電子速度分布

図 4-18 に 3 つの HEMT のゲート容量の L_g 依存性を示す。ゲート容量(C_g)は次式によって導出した。

$$C_g = \frac{\partial Q_{\text{total}}}{\partial V_{\text{GS}}} \quad (4-26)$$

ここで、 Q_{total} はデバイス内の総電荷量である。ゲート長の短縮に伴って、ゲート容量は減少した。200 nm と 10 nm の L_g についてゲート容量を比較すると、 L_g 短縮による InN, $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$, GaN チャネル HEMT のゲート容量の減少率は、それぞれ 85, 85, 87%を示した。

図 4-19 に各 HEMT における f_T のゲート長依存性を示す。 f_T は計算した相互コンダクタンスとゲート容量の結果を次式に代入することより決定した[10]。

$$f_T = \frac{gm}{2\pi C_g} \quad (4-26)$$

ここで、 gm は相互コンダクタンスである。ゲート長を短くすることより、全てのデバイスで f_T が増加することが示された。これは、相互コンダクタンスの劣化率に比べ、ゲート容量の減少率が大きいためである。 $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ チャネル HEMT では、 $L_g=10$ nm にすることにより、 f_T が 1 THz に達することが示された。さらに、InN チャネル HEMT の場合は、 L_g を 50 nm 以下に短縮することにより、1 THz を超える f_T を得ることが可能であり、特に、 $L_g=10$ nm では、 f_T が 1.5 THz に達することが予測された。また、GaN チャネル HEMT では、ゲート長を 10 nm 付近まで短縮した場合、 f_T が飽和傾向を示した。しかし、InN チャネル HEMT では、相互コンダクタンスの劣化が抑制されたため、 $L_g=10$ nm の場合でも、 f_T の飽和傾向は見られなかった。

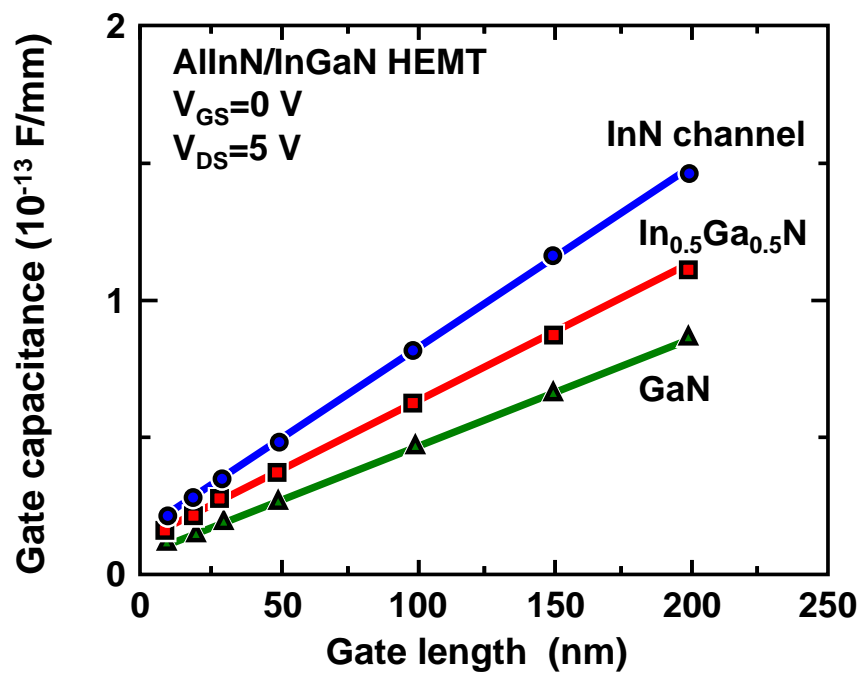


図 4-18 ゲート容量のゲート長依存性

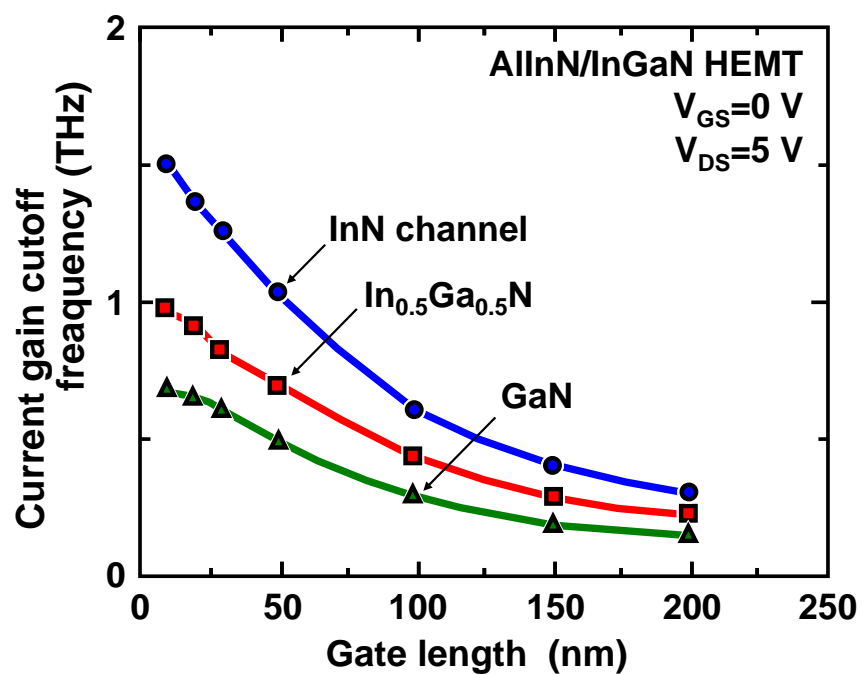


図 4-19 電流利得遮断周波数のゲート長依存性

(ii) ゲート-ドレイン間距離の短縮と電流利得遮断周波数の関係

電流利得遮断周波数を向上させる方法として、一般に、ソース-ゲート間距離やゲート長の短縮が図られてきた。(i)の計算結果でも示したように、ゲート長の短縮はゲート容量を低減させ、 f_T 向上に効果的である。また、ソース-ゲート間距離を短くすることにより、寄生ソース抵抗を下げるができるため、相互コンダクタンスが増加する[11]。結果として、 f_T を向上させることができる。一方、ゲート-ドレイン間距離(Lgd)については、高周波特性を改善するという観点では、これまで重要視されていない。ここでは、 f_T の Lgd 依存性の計算を行い、Lgd 短縮による f_T の向上について述べる。

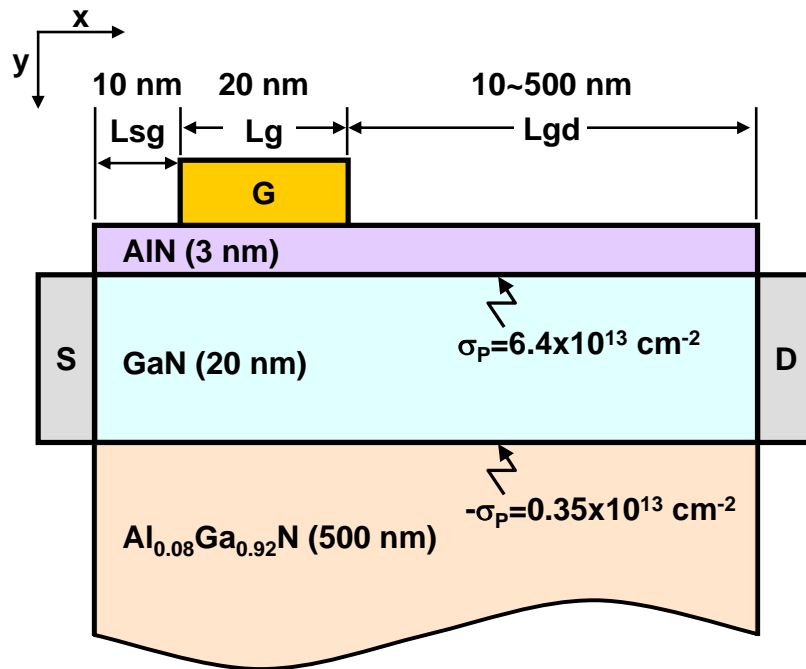


図 4-20 計算に用いたデバイス構造

図 4-20 に、計算に用いた AlN/GaN HEMT の断面図を示す。この構造は、現在報告されている f_T の最高値を示したデバイス構造を参考にした[8]。デバイス構造は 3 nm の AlN 表面障壁層, 20 nm の GaN チャネル層, そして 500 nm の $\text{Al}_{0.08}\text{Ga}_{0.92}\text{N}$ 後方障壁層から成るダブルヘテロ構造 HEMT である。ソース-ゲート間距離およびゲート長はそれぞれ、10 nm と 20 nm で固定した。また、ゲート-ドレイン間距離は 10 ~500 nm の間で変化させた。ここで、10 nm の極めて短い Lgd 長は、耐圧が非常に低くなることが予想され、実用的なデバイス応用には適さないかもしれないが、Lgd 依存性をより明確に示すために計算に取り入れた。初期粒子数は 20000 個とし、自由走行時間 0.01fs、ポテンシャル更新時間 0.05fs、および、メッシュ間隔として、 $\Delta x=1$ nm, $\Delta y=1$ nm を用いた。考慮した散乱機構は有極性光学フォノン散乱、

無極性光学フォノン散乱、音響フォノン散乱、圧電ポテンシャル散乱である。

図 4-21 (a)に $L_{gd}=10, 50, 500 \text{ nm}$ の場合のチャネル電界分布を比較して示す。ここで、横軸はドレイン側のゲート電極端を基準(0 nm)とした。 $-20\sim 0 \text{ nm}$ の位置はゲート電極下に相当する。電界が最大値に達する位置は L_{gd} にほとんど依存せず、ゲート電極のドレイン端に現れている。しかし、電界の最大値は L_{gd} に依存した。 $L_{gd}=500 \text{ nm}$ の場合、最大電界は 2.5 MV/cm であり、 $L_{gd}=10 \text{ nm}$ では、電界の最大値が 3.5 MV/cm に増加した。さらに、図 4-21 (a)を注意深く観察すると、電界の最大値だけではなく、ゲート下($-20\sim 0 \text{ nm}$ の位置)の電界分布も L_{gd} の短縮に伴って、増加することが分かる。特に、 $L_{gd}=10 \text{ nm}$ の場合は、ゲート電極下の電界分布が全体に渡って、 $L_{gd}=500 \text{ nm}$ の場合よりも 60%以上高くなった。図 4-21 (b)に電界の最大値および平均値の L_{gd} 依存性をまとめる。ここで、平均値とは、ゲート電極下の領域のチャネル電界を平均したものに相当する。 $L_{gd}>50 \text{ nm}$ の場合は、電界分布があまり変わらないために、電界の最大値と平均値はともに L_{gd} にほとんど依存しない。しかし、 L_{gd} が 50 nm 以下になると、電界の最大値と平均値の両方が増加することを示した。

図 4-22 (a)に $L_{gd}=10, 50, 500 \text{ nm}$ の場合の平均チャネル電子速度分布を示す。ここで、横軸は図 4-21 (a)に合わせて設定した。図 4-21 に示した電界分布を反映して、平均チャネル電子速度が、 L_{gd} の短縮と共に、増加することが分かった。電子速度のピーク値は、 L_{gd} を 10 nm に短縮することで、 $7.3\times 10^7 \text{ cm/s}$ にまで達した。また、ゲート電極下のチャネル電子速度も L_{gd} の短縮に伴って増加することが分かる。さらに、 $L_{gd}=10 \text{ nm}$ の場合、チャネル電子速度はドレイン電極に到達する直前まで高い速度を保っている。すなわち、電子は速度オーバーシュートした状態のままドレイン電極に到達する。一方、 $50, 500 \text{ nm}$ の L_{gd} の場合、ドレイン電極に到達する前に、ゲート端から $20\sim 30 \text{ nm}$ の領域で、定常状態の速度に戻る。図 4-22 (b)にチャネル電子速度のピーク値およびゲート電極下のチャネル電子速度の平均値の L_{gd} 依存性にまとめる。チャネル電子速度の最大値と平均値ともに L_{gd} が 50 nm 以上のときはほとんど違いがない。しかし、 L_{gd} が 50 nm 以下では、 L_{gd} の短縮とともに、両方ともに増加することが分かる。 L_{gd} を 500 nm から 10 nm に短縮することにより、最大値、平均値はそれぞれ、 $6.3\times 10^7 \text{ cm/s}$ から $7.3\times 10^7 \text{ cm/s}$ 、 $5.6\times 10^7 \text{ cm/s}$ から $6.7\times 10^7 \text{ cm/s}$ に増加した。以上の結果をまとめると、 L_g が 20 nm の短ゲート長デバイスであるため、 $L_{gd}=500 \text{ nm}$ の場合でも、速度オーバーシュートは起こった。しかし、 $L_{gd}<50 \text{ nm}$ の短縮は、短チャネル効果によって起こる速度オーバーシュートをさらに強める効果があることが分かった。この L_{gd} 短縮による速度オーバーシュートの強まりは、 f_T の向上に有効であると考えられる。そこで、 f_T の L_{gd} 依存性の計算を行った。ここでの f_T は、ゲート電極に 100 mV の交流振幅を印加したときの電流利得 h_{21} の周波数依存性の計算結果から導出した。

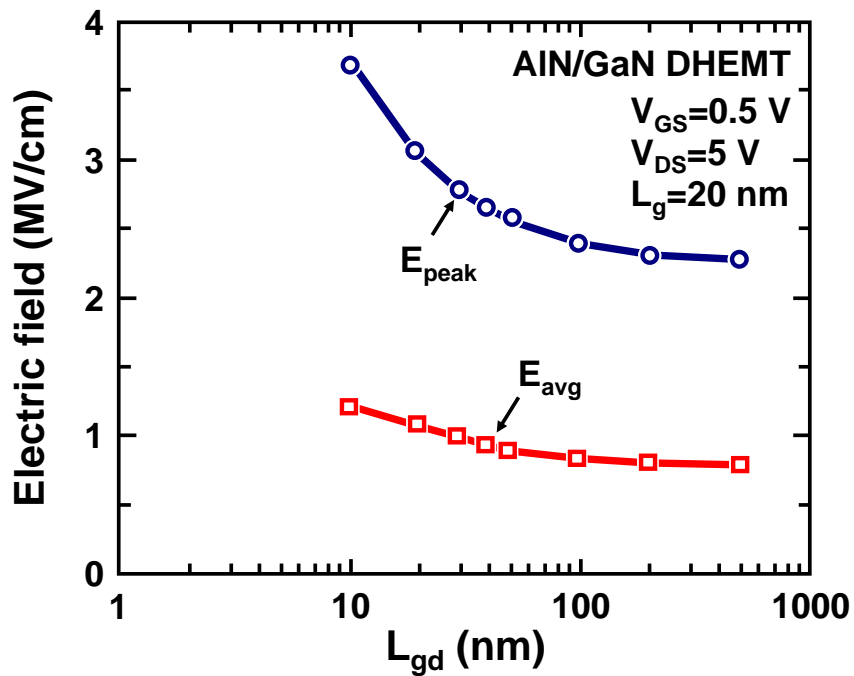
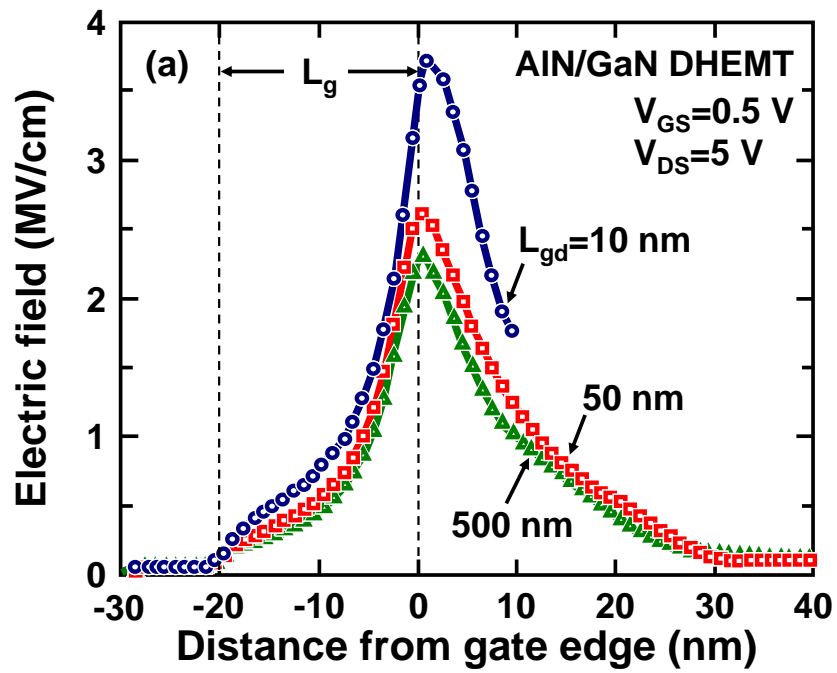


図 4-21 (a) $L_{gd}=10, 50, 500$ nm のチャネル電界分布および
(b) 電界のピーク値(E_{peak})および平均値(E_{avg})の L_{gd} 依存性

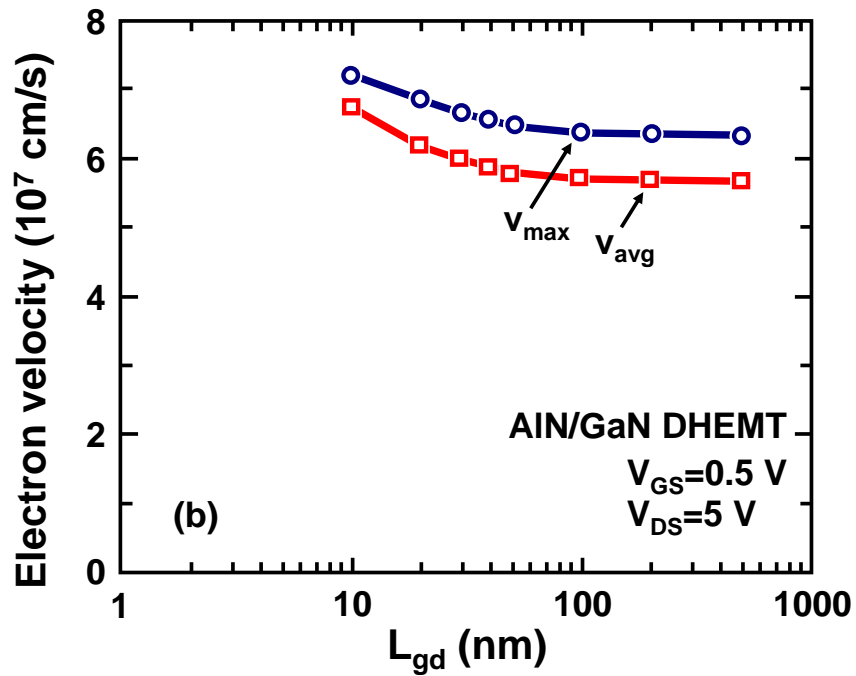
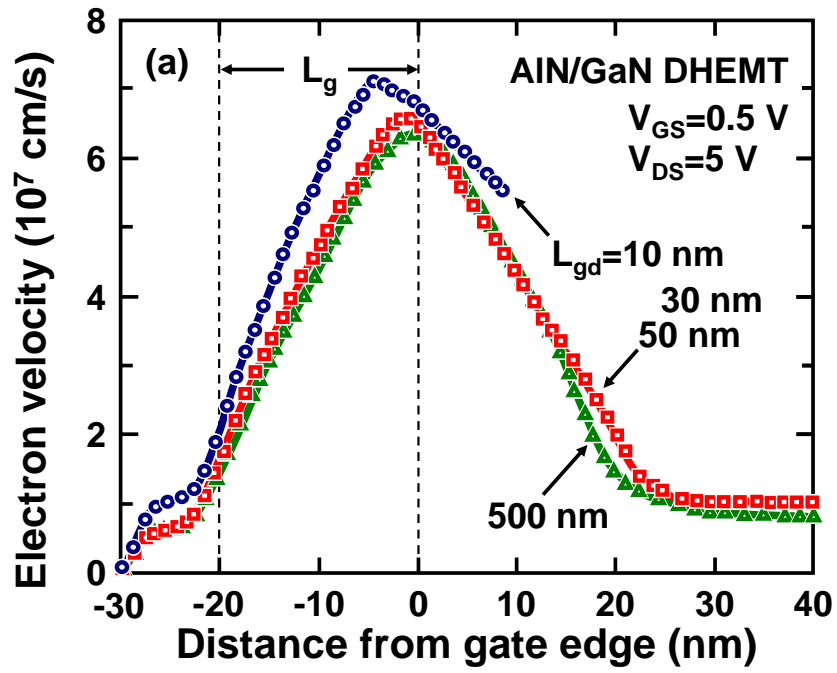


図 4-22 (a) $L_{gd}=10, 50, 500$ nm のチャネル電子速度分布および
(b) 電子速度の最大値(v_{max})および平均値(v_{avg})の L_{gd} 依存性

図 4-23 に計算した f_T の L_{gd} 依存性を示す。挿入図は、 $L_{gd}=100$ nm のデバイスについて、 $V_{GS}=0.5$ V, $V_{DS}=5$ V のバイアス条件下で計算したときの電流利得 h_{21} の周波数依存性を示している。ここで、周波数は 20~600 GHz の間で変化させた。 $L_{gd}=100$ nm の場合、 f_T は約 1 THz を示した。図 4-23 から、 L_{gd} を 500 nm から 10 nm に短縮することにより、 f_T は 1 THz から 2 THz に増加することが分かる。 f_T の向上が示された理由は、 L_{gd} 短縮によってチャネル電子が増加したためである(図 4-22)。 f_T は実効電子速度に比例することが知られている[10]。実効電子速度は実効ゲート長($L_g+\Delta L_g$)間の平均電子速度であるため、図 4-22 で示したチャネル電子速度の平均値とは厳密には異なる。しかし、 L_{gd} 短縮によって平均値がまた増加したことから、 $L_{gd}\leq 20$ nm では、電子が速度オーバーシュートを維持したままドレイン電極に到達したという計算結果から、 L_{gd} 短縮は実効電子速度も増加させる効果をもつと考えられる。以上のように、高周波特性の向上に関してこれまで考慮されたことのないゲート-ドレイン間距離の短縮効果について、チャネル内の電界および速度分布、そして、 f_T を計算することにより、 L_{gd} の短縮が速度オーバーシュートを強め、結果として、 f_T の向上に有効であることを初めて示した。

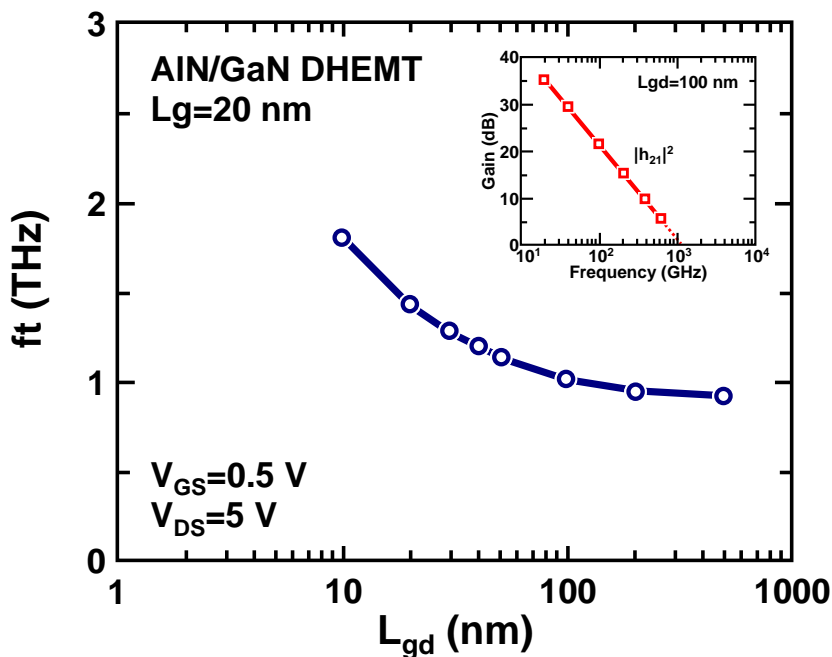


図 4-23 電流利得遮断周波数の L_{gd} 依存性

4-3-3 三端子オフ耐圧解析

窒化物半導体はバンドギャップが大きいので、高電圧動作が可能である。試作例を見ると、縦型 GaN 系デバイスの耐圧では、実効的な破壊電界は 2 MV/cm を超えている [12]。一方、横型 GaN 系デバイスの場合、1 MV/cm 程度の実効破壊電界が報告されている[13-15]。また、衝突イオン化によって決定される耐圧の理論計算を AlGaIn/GaN HEMT について行った報告例では、実効破壊電界が 1.6 V/cm である[16]。つまり、従来の計算結果からは、AlGaIn/GaN HEMT の破壊電界を縦型デバイスと同程度の破壊電界にまで改善することは困難であると予測される。しかし、従来計算に用いられた衝突イオン化モデルは、第 2, 3 章で述べたように、バンド指数が無視された単純なエネルギー平均を考慮したものであった。つまり、これまでの衝突イオン化モデルに関する議論から、従来の耐圧とその破壊電界の計算結果は過小評価された値であることが考えられる。そこで、この節では、提案モデルと従来モデルを用いて AlGaIn/GaN HEMT の三端子耐圧を計算し、その結果を比較することにより、AlGaIn/GaN HEMT の耐圧改善の可能性について議論する。

図 4-24 に計算に用いた AlGaIn/GaN HEMT の断面構造を示す。デバイス構造は Al 組成 0.25 のアンドープ AlGaIn 障壁層(25 nm)、アンドープ GaN チャネル層(250 nm)である。ソース-ゲート間距離、ゲート長はともに 1 μm 、ゲート-ドレイン間距離は 3 μm とした。また、AlGaIn/GaN 界面に $1.1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ の分極電荷を仮定した。初期粒子数は 10000 個、自由走行時間 0.1fs、ポテンシャル更新時間 0.5fs、および、メッシュ間隔として、 $\Delta x=1 \text{ nm}$, $\Delta y=1 \text{ nm}$ を用いた。考慮した散乱機構は有極性光学フォノン散乱、無極性光学フォノン散乱、音響フォノン散乱、圧電ポテンシャル散乱、衝突イオン化である。

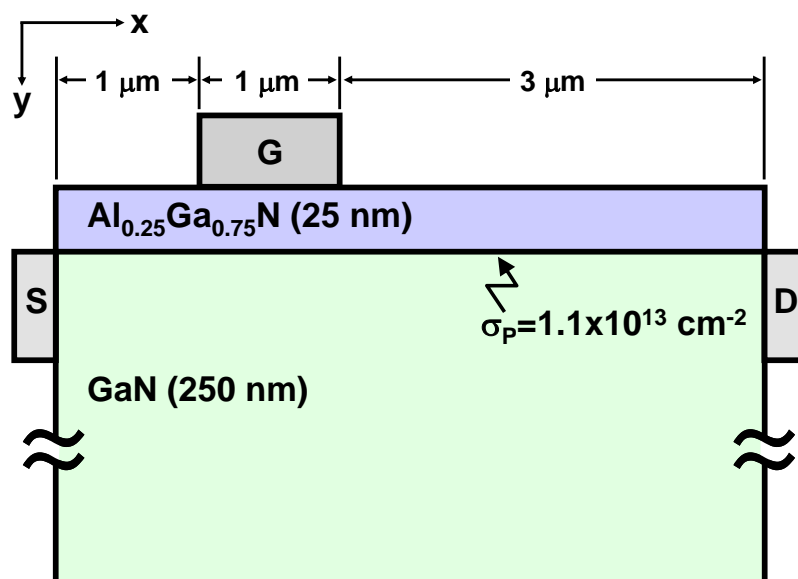
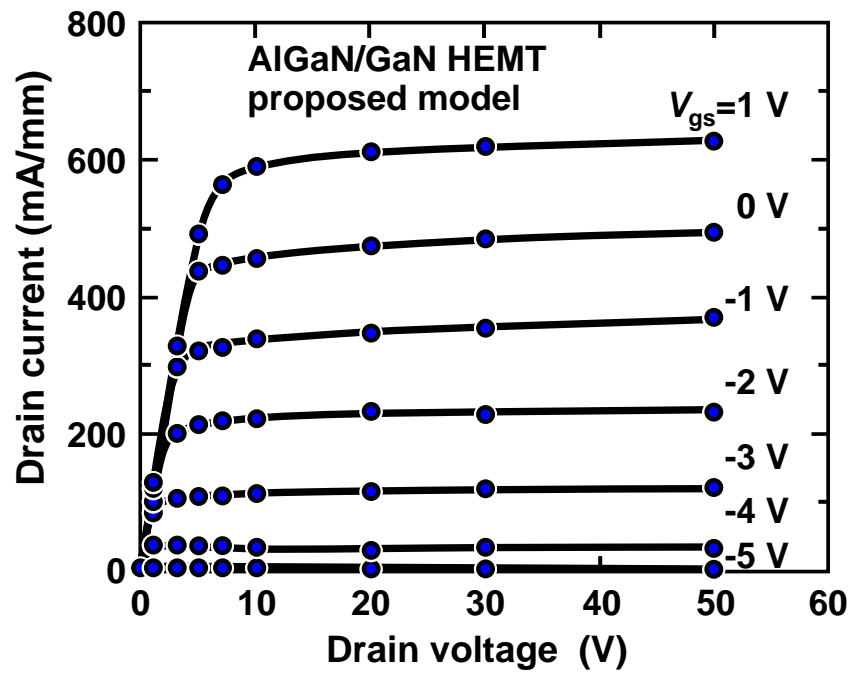


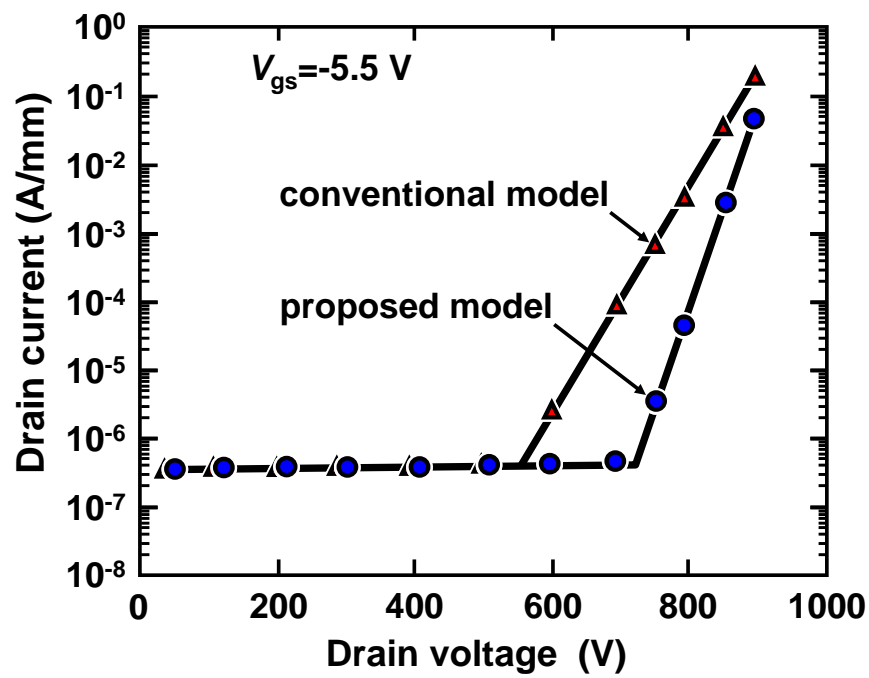
図 4-24 計算に用いた AlGaIn/GaN HEMT の断面構造

図 4-25 に (a) $V_{GS}=-5\sim 1\text{ V}$, $V_{DS}=0\sim 50\text{ V}$ を印加した時の I-V 特性と、(b) $V_{GS}=-5.5\text{ V}$ 時の耐圧特性を示す。図 4-25(b)において、丸印は提案モデルを用いた計算結果であり、三角印は従来モデルを用いた計算結果である。I-V 特性は、よい飽和特性およびピンチオフ特性を示した。最大ドレイン電流は 600 mA/mm 、しきい値電圧は -4.5 V であった。また、従来モデルの場合の I-V 特性は提案モデルの結果と同じであった。これは、 $V_{DS}=50\text{ V}$ までは、衝突イオン化過程が起こらず、そのため、両者の解析条件が一致するためである。図 4-25 (b) に示す耐圧(V_B)は、提案モデル、従来モデルでそれぞれ、 720 V と 550 V である。提案モデルの耐圧が従来モデルよりも 30% 高い値を示した。この結果は、従来モデルによる計算のほうが、衝突イオン化回数が多い(起こりやすい)ことを意味しており、第 3 章の衝突イオン化係数で示した結果と一致する。すなわち、従来モデルでは、衝突イオン化の遷移確率の近似が過剰な見積もりに相当し、そのため、低いドレイン電圧で衝突イオン化が起こり、その結果、低い耐圧が示された。

得られた耐圧の値とゲート-ドレイン間距離を用いた実効的な破壊電界(V_B/L_{gd})を計算すると、提案モデルと従来モデルの実効破壊電界はそれぞれ、 $2.4, 1.8\text{ MV/cm}$ である。従来モデルによる計算結果は従来の報告例とほとんど同じ値である[16]。提案モデルから得られた実効破壊電界は、従来モデルのものだけでなく、これまでに報告されている実際に試作された横型デバイスのものより高い値を示し、また、それは縦型デバイスのもので同等の値が得られることを意味している。つまり、この計算結果は、実際のデバイスにおいて、耐圧が現状のゲート電極やバッファ層の漏れ電流で決まるのではなく、衝突イオン化によって決まるようになれば、さらに高い耐圧が得られる可能性を示唆している。



(a)



(b)

図 4-25 (a)I-V 特性と(b) $V_{GS}=-5.5$ V 時の I-V 特性

4-4 まとめ

この章では、フルバンド構造に基づくデバイス解析の手法について述べた。計算手法には、第 3 章で述べたモンテカルロ法を用いた輸送計算と、実空間上の電子分布およびポテンシャル分布を考慮した自己無撞着計算が取り込まれた。ポテンシャル分布を決定する離散化したポアソン方程式の解法には、ILUBCG 法を利用した。構築したデバイスプログラムを用いて、I-V 特性、電子分布、ポテンシャル分布などの計算結果を示した。また、高周波特性と三端子耐圧の計算を行った。高周波特性として電流利得遮断周波数の計算を行い、チャンネル材料に InGa_N を用いることにより、チャンネル内の電子速度が増加し、 f_T が向上することを示した。特に、In 組成 0.5 以上の InGa_N をチャンネル層に用いた AlInN/InGa_N HEMT はテラヘルツ帯で動作可能であることを示唆した。また、これまで、 f_T 向上という観点では、注目されていないゲート-ドレイン間距離の短縮について高周波特性に及ぼす効果を議論した。ゲート-ドレイン間距離の短縮は、ゲート電極付近の電界集中を増加させ、さらに、短ゲート長デバイスで顕著に起こる速度オーバーシュートをさらに強めるということを初めて示した。この速度オーバーシュートを強めるという効果を反映して、 f_T が向上することを確認した。また、提案モデルと従来モデルを用いた AlGa_N/Ga_N HEMT の三端子耐圧の計算を行い、計算結果を比較した。提案モデルによって計算した耐圧(720 V)は従来モデルによる結果(550 V)よりも高い値を示した。この結果は、従来モデルが衝突イオン化回数を起こしやすいモデルであることを意味しており、第 3 章で述べた衝突イオン化係数の結果と一致した。提案モデルは、デバイスの破壊耐圧を計算する上で、従来モデルと比較すると、同等の短い計算時間を維持したまま、より精度の高い計算が可能であることが分かった。また、提案モデルを用いた場合、AlGa_N/Ga_N HEMT が 2 MV/cm 超える破壊電界に相当する電圧範囲で動作可能であることが示された。

参考文献

- [1] Y. Hori, M. Kuzuhara, Y. Ando, and M. Mizuta, “Analysis of electric field distribution in GaAs metal-semiconductor field effect transistor with a field-modulating plate,” *J. Appl. Phys.*, 87, 3483, 2000.
- [2] 服部 力, 名取 亮, 小国 力, “Fortran77 による数値計算ソフトウェア”, (丸善, 1990).
- [3] O. Ambacher, B. Foutz, J. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, A. J. Sierakowski, W. J. Schaff, L. F. Eastman, R. Dimitrv, A. Mithell, and M. Stuzmann, “Two dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization in undoped and doped AlGa_N/Ga_N heterostructures,” *J. Appl. Phys.*, 87, 334, 2000.
- [4] S. Karmalkar and U. K. Mishra, “Enhancement of breakdown voltage in AlGa_N/Ga_N high electron mobility transistors using a field plate,” *IEEE Trans. on Electron Devices*, 48, 1515, 2001.
- [5] M. Higashiwaki, T. Mimura, and T. Matsui, “AlGa_N/Ga_N heterostructure field-effect transistors on 4H-SiC substrates with current-gain cutoff frequency of 190 GHz,” *Appl. Phys. Express*, 1, 021103, 2008.
- [6] H. Sun, A. R. Alt, H. Benedickter, E. Feltn, J. F. Carlin, M. Gonschorek, N. Grandjean, and C. R. Bolognesi, “205-GHz (Al, In)N/Ga_N HEMTs,” *IEEE Electron Device Lett.*, 31, 957, 2010.
- [7] D. S. Lee, X. Gao, S. Guo, D. Kopp, P. Fay, and T. Palacios “300-GHz InAlN/Ga_N HEMTs with InGa_N back barrier,” *IEEE Electron Device Lett.*, 32, 1525, 2011.
- [8] K. Shinohara, D. C. Regan, Y. Tang, A. L. Corrión, D. F. Brown, J. F. Robinson, H. H. Fung, A. Schmitz, T. C. Oh, S. J. Kim, P. S. Chen, R. G. Nagele, A. D. Margomenos, and M. Micovic, “Scaling of Ga_N HEMTs and Schottky Diodes for Submillimeter-Wave MMIC Applications,” *IEEE Trans. on Electron Devices*, 60, 2982, 2013.
- [9] G. H. Jessen, R. C. Fitch, Jr., J. K. Gillespie, G. Via, A. Crespo, D. Langley, D. J. Denninghoff, M. Trejo, Jr., and E. R. Heller, “Short-channel effect limitations on high-frequency operation of AlGa_N/Ga_N HEMTs for T-Gate Devices,” *IEEE Trans. on Electron Devices*, 60, 2982, 2013.
- [10] G. Dechun, Q. Kankan, F. Marino, D. K. Ferry, S. M. Goodnick, and M. Saraniti, “Aspect ration impact on RF and DC performance of state-of-the-art short-channel Ga_N and InGaAs HEMTs,” *IEEE Electron Devices Lett.*, 31, 1217, 2010.
- [11] S. Russo and A. D. Carlo, “Influence of the source- gate-distance on the AlGa_N/Ga_N HEMT

第 5 章 結論

第 2 章では、経験的擬ポテンシャル法に基づき、ウルツ鉱構造結晶に対するエネルギーバンド構造の計算手法を述べた。また、擬ポテンシャル法を用いて計算した GaN, InN, AlN のエネルギーバンド構造の計算結果を示した。InN と AlN に関する有効な擬ポテンシャルパラメータの報告がなかったため、物性値を再現できるパラメータを本研究で新たに導出した。また、混晶半導体のバンド構造を決定する場合、その擬ポテンシャルパラメータは、仮想結晶近似を考慮して、2 元素半導体各々の擬ポテンシャルパラメータを用いることにより、問題なく計算できることが分かった。さらに、数値計算したバンド構造を用いて決まる状態密度および各散乱機構の散乱確率の計算結果についても述べた。各散乱確率の結果を比較すると、低い電子エネルギーでは、有極性光学フォノン散乱の LO モードの放出過程が支配的であり、一方、高エネルギーでは、無極性光学フォノン散乱が支配的であることを分かった。また、自発分極を有するウルツ鉱構造 GaN において、圧電ポテンシャル散乱は音響フォノン散乱と同程度の散乱確率を有することが分かった。フルバンド構造を用いて計算する衝突イオン化の遷移確率の厳密モデル計算を示し、遷移確率のエネルギー依存性について、詳細に議論した。従来モデルの問題点を改良する方法として、バンド指数を考慮し、厳密的な計算に近い結果が得られ、かつ、現実的な計算時間の範囲内で計算結果を得ることができる新しいモデルを提案した。

第 3 章では、モンテカルロ法を用いたボルツマン輸送方程式の解法を述べ、電子輸送解析の手法を示した。また、電子の自由走行や散乱過程を経て、電子状態が変化する場合の電子状態の決定は、第 2 章で示したエネルギーバンド構造や散乱確率などをデータ表として用いることにより行った。データ表は、8 分の 1 の還元した第一ブリルアンゾーン内に対して作成した。そのデータ表と微小体積の体積比によって、第一ブリルアンゾーン内の任意の電子状態を決定した。このとき、第一ブリルアンゾーン内に電子状態があるか否かの判定が必要であり、そのための波数ベクトルの境界条件を示した。もし、電子状態が第一ブリルアンゾーン外に存在した場合、逆格子ベクトルを用いることにより、第一ブリルアンゾーンに還元する方法についても述べた。以上のような条件の下、モンテカルロ法を用いてボルツマン輸送方程式を解き、窒化物半導体の速度-電界特性を求めた。また、計算結果から、データ表を作成するための運動量空間に考慮するメッシュ間隔 Δk は、第一ブリルアンゾーンの規格化した k_x, k_y, k_z 成分それぞれに対して、 $\Delta k_x \leq 1/40, \Delta k_y \leq 1/40, \Delta k_z \leq 1/40$ にすべきであることが分かった。速度-電界特性の計算結果から、速度オーバーシュート効果の大きさは電界に依存し、3 MV/cm の電界下で、GaN の速度オーバーシュートは定常状態のピーク電子速度の 2 倍高い速度を示すことが分かった。また、第 2 章で述べた衝突イオン化のモデルを用いて、衝突イオン化係数の計算を行った。従来モデルの結果は厳密モデルの結果に比べ、6 倍以上高い値を示し、衝突イオン化係数を過大評価する近似モデルで

あり、一方、提案モデルはイオン化係数の過大評価を抑えることができることが分かった。また、厳密モデルを用いた場合、衝突イオン化係数の計算時間は、提案モデルと従来モデルの場合と比べて、10 倍以上を要した。衝突イオン化係数の計算を十分に短い計算時間で、かつ、高い精度で行うためには、提案モデルが有効であることを示した。

第 4 章では、フルバンド構造に基づいたデバイス解析の手法について述べた。計算手法は、第 3 章で述べた輸送解析手法を軸として、実空間上の電子分布とポテンシャル分布の自己無撞着な計算を加えたもので構成された。ポテンシャル分布を求めるためのポアソン方程式は、ILUBCG 法を用いて計算した。構築したデバイスプログラムを用いて、I-V 特性、電子分布、ポテンシャル分布などを詳細に計算できることを示した。これに加え、高周波特性と三端子耐圧の計算を行った。高周波特性として電流利得遮断周波数の計算を行い、チャネル材料に InGa_N を用いることにより、チャネル内の電子速度が増加し、 f_T が向上した。特に、In 組成が 0.5 以上の InGa_N をチャネル層とした AlIn_N/InGa_N HEMT はテラヘルツ帯で動作可能であることが示唆された。また、これまで、 f_T 改善という観点では、注目されていないゲート-ドレイン間距離の短縮が高周波特性に及ぼす効果を議論した。ゲート-ドレイン間距離の短縮に伴って、電界集中の広がりが抑制され、短ゲート長デバイスで顕著に起こる速度オーバーシュートがさらに強まることを初めて示した。この効果を反映して、 f_T が向上することを確認した。また、提案モデルと従来モデルを用いて、AlGa_N/Ga_N HEMT の三端子耐圧の計算を行い、計算結果を比較した。提案モデルで計算した耐圧(720 V)は従来モデルによる結果(550 V)よりも高い値を示した。この結果は第 3 章で述べた衝突イオン化係数の大小関係と一致した。提案モデルは、デバイスの破壊耐圧を計算する上で、従来モデルと比較すると、同等の短い計算時間を維持したまま、より精度の高い計算が可能であることが分かった。また、提案モデルを用いた場合、AlGa_N/Ga_N HEMT が 2 MV/cm 超える破壊電界に相当する電圧範囲で動作可能であることが示された。

謝辞

本研究を遂行するに際し、多忙な中、終始貴重かつ有益な御教示、御助言をいただきました福井大学大学院工学研究科電気・電子工学専攻 葛原正明教授に心より厚く感謝の意を表します。

また、本論文に対して委員を務めていただいた、福井大学大学院工学研究科電気・電子工学専攻 福井一俊教授、勝山俊夫教授、茂呂 征一郎准教授に深く御礼申し上げます。

本研究をエネルギーバンド構造および散乱確率の数値計算を行う上で、大変有益な助言・御指導をしていただきま大阪大学工学研究科 電気電子情報工学専攻、森 伸也准教授、鎌倉 良成准教授に謹んで感謝の意を表します。

福井大学大学院工学研究科電気・電子工学専攻在学中、御指導，御鞭撻頂いた福井大学工学部電気・電子工学科諸先生方に深く感謝いたします。

最後に、日ごろ御討論頂いた福井大学工学部電気・電子工学科電子デバイス研究室の皆様
に感謝致します。

研究発表

論文

- 1 K. Kodama and M. Kuzuhara, “Theoretical simulation of DC and RF performance for AlInN/InGaN/AlInN double-heterojunction FET using a Monte Carlo approach”, IEICE Electronics Express, vol. 5 (2008) 1074-1079
- 2 H. Tokuda, K. Kodama, and M. Kuzuhara, “Temperature dependence of electron concentration and mobility in n-GaN measured up to 1020K”, Appl. Phys. Lett., vol. 96 (2010) 252103
- 3 K. Kodama, H. Tokuda, and M. Kuzuhara, “A model for calculating impact ionization transition rate in wurtzite GaN for use in breakdown voltage simulation”, J. Appl. Phys., vol. 114 (2013) 044509

総説

- 1 葛原 正明, 児玉 和樹, “半導体デバイス研究開発のためのシミュレーションの利用”, 電気評論, 589 (2013) 34-39

学術講演

- 1 K. Kodama, T. Nishida, K. Shiojima, and M. Kuzuhara, “RF Performance Simulation of Double Heterojunction FETs with an InGaN Channel,” IEEE IMFEDK (2007) 91-92
- 2 K. Kodama, T. Nishida, K. Shiojima, and M. Kuzuhara, “Simulation of rf performance for AlInN/InN/AlInN double-heterojunction FETs,” ICNS7 (2007)
- 3 T. Okai, K. Kodama, and M. Kuzuhara, “AlGaN/GaN Heterojunction Diodes with Low Turn-on and High Breakdown Voltages,” 8th TWHM (2009) 22-23
4. T. Kimizu, K. Kodama, and M. Kuzuhara, “Monte Carlo simulation of drift and hall mobilities in n-type GaN,” IEEE IMFEDK (2010)
5. K. Kodama, T. Kimizu, and M. Kuzuhara, “Calculation of impact ionization rate in wurtzite GaN,” Global COE SCIENT (2010)
- 6 K. Kodama, T. Tokuda, and M. Kuzuhara, “Theoretical calculation of impact ionization coefficients considering band index for wurtzite GaN,” 9th TWHM (2011) 105-106

- 7 Y. Kamiya, K. Kodama, T. Kimizu, T. Tokuda, and M. Kuzuhara, "Analysis of electron transport in AlGa_N based on empirical pseudopotential method," IEEE IMFEDK (2012)
- 8 K. Kodama, Y. Naito, T. Tokuda, and M. Kuzuhara, "Improved effective channel electron velocity in AlGa_N/Ga_N HEMTs with sub-100 nm gate-to-drain distance," SSDM (2012) F-2-4
- 9 K. Kodama, T. Tokuda, and M. Kuzuhara, "Improved Dependence of gate-to-drain distance on electron velocity in Al_N/Ga_N HEMTs," IWCE (2013) P55
10. 児玉 和樹, 西田 猛利, 塩島 謙次, 葛原 正明, "InGa_N チャネルをもつダブルヘテロ接合 FET の高周波特性解析," 電子情報通信学会総合大会 (2007. 3) C-10-14
11. 児玉 和樹, 西田 猛利, 塩島 謙次, 葛原 正明, "AlIn_N/InGa_N ヘテロ接合 FET における高周波特性の理論検討," 電子情報通信学会技術研究報告 (2007.8) 77-80
12. 児玉 和樹, 西田 猛利, 塩島 謙次, 葛原 正明, "AlIn_N/InGa_N/AlIn_N ダブルヘテロ接合 FET の高周波特性解析," 電子情報通信学会総合大会 (2008.3) C-10-11
13. 畑野 舞子, 児玉 和樹, 酒井 亮輔, 葛原 正明, "傾斜フィールドプレート AlGa_N/Ga_N HEMT の耐圧解析—2 層絶縁膜の効果—," 電子情報通信学会ソサイエティ大会 (2009.9) C-10-2
14. 児玉 和樹, 木水 拓也, 徳田 博邦, 葛原 正明, "ウルツ鉍構造 Ga_N の衝突イオン化," 電子情報通信学会ソサイエティ大会 (2010.8) C-10-17
15. 児玉 和樹, 木水 拓也, 徳田 博邦, 葛原 正明, "ウルツ鉍構造 Ga_N の衝突イオン化の衡理論計算," 応用物理学会学術講演会 (2011.3) 27A-P9-2
16. 児玉 和樹, 木水 拓也, 徳田 博邦, 葛原 正明, "電子分布を考慮したウルツ鉍構造 Ga_N の衝突イオン化モデル," 応用物理学会学術講演会 (2011.8) 2A-H-9
17. 児玉 和樹, 徳田 博邦, 葛原 正明, "フルバンドモデルに基づく AlGa_N/Ga_N HEMT の衝突イオン化の理論検討," 電子情報通信学会技術研究報告 (2012.7) 41-53
18. 児玉 和樹, 木水 拓也, 徳田 博邦, 葛原 正明, "AlGa_N/Ga_N HEMT 衝突イオン化に関するモンテカルロ解析," 応用物理学会学術講演会 (2012.8) 12P-F2-6